现代应用数学丛书

结晶统计与代数

〔日〕伏見康治　庄司一郎　著

上海科学技术出版社

现代应用数学丛书

结晶统计与代数

〔日〕伏見康治
庄司一郎 著

孙 澤 瀛 譯

張 宗 燧 校



上海科学技术出版社

內 容 提 要

本书是日本岩波书店出版的現代应用数学丛书之一的中譯本，介紹將代数学应用到晶体的秩序化現象上去的一些理論。全书共分三章，前二章叙述一些基本概念及有关表里变换、$Y-\Delta$变換的理論，第三章介紹代数的解法。可供高等学校数学系、物理系师生及科研工作者作参考。

現代应用数学丛书

结 晶 统 计 与 代 数

原 书 名　結晶統計と代数
原 著 者　〔日〕伏見康治　庄司一郎
原出版者　岩波书店 1957
譯　　者　孙 泽 瀛
校　　者　張 宗 燧

*

上海科学技术出版社出版
（上海瑞金二路450号）
上海市书刊出版业营业許可証出093号
新华书店上海发行所发行　各地新华书店經售
商务印书館上海厂印刷

*

开本 850×1168 1/32　印張 1 28/32　字数 42,000
1962年12月第1版　1962年12月第1次印刷
印数 1—3,600

統一书号：13119・488
定　　价：（十四）0.34元

出版說明

这一套书是根据日本岩波书店出版的"現代应用数学讲座"翻譯而成。日文原书共15卷60册，分成A、B两組，各編有序号。現在把原来同一題目分成两册或三册的加以合拌，整理成42种，不另分組編号，陆續翻譯出版。

这套书涉及的面很广，其內容都和現代科学技术密切有关，有一定参考价值。每一本书收集的資料都比較丰富，而叙述扼要，篇幅不多，有利于讀者以較短时間掌握有关学科的主要內容。虽然，这套书的某些观点不尽适合于我国的情况，但其方法可供参考。因此，翻譯出版这一套书，对我国学术界是有所助益的。

由于日文原书是1957年起以讲座形式陆續出版的，写作时間和篇幅的限制不可避免地会影响原作者对內容的处理，为了尽可能地減少这种影响，我們在每一譯本中，特請譯者或校閱者撰写序或后記，以介紹有关学科的最近发展状况，并对全书內容作一些評价，提出一些看法，結合我国情况补充一些資料文献，在文內过于簡略或不足的地方添加了必要的注釋和改正原书中存在的一些錯誤。希望这些工作能对讀者有所帮助。

承担翻譯和校閱的同志，为提高书籍的质量付出了巨大劳动，在此特致以誠摯的謝意。

欢迎讀者对本书提出批評和意見。

上海科学技术出版社

目　　录

第1章 緒　　論

§1 Boltzmann 因子，状态和，热力学的平均值

与保持絕对溫度 $T°$K 的恒温槽作热接触的平衡体系，其呈現能量 E 的'状态'概率是与

$$\exp(-E/kT) \tag{1.1}$$

成比例的。这里的 k 是 **Boltzmann 常数**，其数值是 1.38×10^{-16} (erg/度)。(1.1) 称为 **Boltzmann 因子**。如果这个状态处于簡幷(degeneration)的情况，那就是說，有好些个状态共有同一能量值 E 的情况，这时，对于这些状态的全体，在(1.1)之前不能不用状态总数 g 去乘。g 称为这时的**統計权重**(stàtistical weight)。

作为概率而言，Boltzmann 因子还不是归一化的，真正的概率应該是就所有的状态归幷而得的

$$Z(T)=\sum_i \exp(-E_i/kT) \tag{1.2}$$

去除(1.1)。由(1.2)規定的 Z 叫做**状态和**，我們知道体系的热力学性质可归結到 Z 的函数形式中去考慮。其最显明的例証从求体系的**能量平均值**就可看出：

$$\begin{aligned}\langle E\rangle&=\sum_i E_i\exp(-E_i/kT)/Z(T)\\&=-\frac{\partial}{\partial(1/kT)}[\log Z(T)],\end{aligned} \tag{1.3}$$

这就是說，能量平均值是由状态和关于温度的倒数作对数微分而得到的。从此，我們还知道体系之**热容量** C 是由下式給定的：

$$C=\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial T}=\frac{k}{T^2}\frac{\partial^2}{\partial(1/kT)^2}[\log Z(T)]. \tag{1.4}$$

如果考慮的体系規定为力学系，那就不能不指定若干个参数

值。例如在气体的情况下，容納气体的容器之体积 V 就成为問題了(就力学来讲，这个容器之詳細描述，例如說，是正六面体，其三棱之长是 a, b, c 等，是必要的；就討論热平衡的統計力学来讲，只有积 $V=abc$ 才是起着作用的)。設有一个参数是 x，限定它緩慢地、准靜地(quasi-static)而且絕热地(adiabatic)只变化 dx 时，外部对于这个体系所作的功写作 Xdx，那么，X 可以看成是沿参数 x 之增长方向所加的"力"。根据統計力学所教示的，力 X (其平均值)可从状态和的知識利用

$$X=-kT\frac{\partial}{\partial x}[\log Z(T)] \tag{1.5}$$

而求得。参数 x 包含在規定状态和的各个能量値 E_i 之中。試就特殊情况来考慮，例如說，容納气体的容器之体积 V 增加了 dV (即膨脹)，这时对于气体所作的功(将上述一般定义中的符号改换一下)写成 $-PdV$，这里的系数 P 特别称做**压力**，这压力可由公式

$$P=+kT\frac{\partial}{\partial V}[\log Z(T)] \tag{1.6}$$

求出。再例如磁性体。設磁矩为 M，使其产生这样的磁化所必需的外部磁場之强度为 $\mathfrak{H}$，$-Md\mathfrak{H}$ 是磁場增强情况下所出現的能量。这时相当于(1.5)我們有形式

$$M=+kT\frac{\partial}{\partial \mathfrak{H}}[\log Z(T)]. \tag{1.7}$$

由于从(1.3)与(1.5)两式可以推导出体系的全部热力学性质，所以討論統計力学归結为計算状态和 Z. 要求状态和，首先对所考慮的物质体系制訂出适当的力学模型是必要的，由此，确定能量的特征值 E_i. 前一阶段的事属于整个物理学的問題，从决定了力学結构(亦即决定体系的 Hamilton 函数)因而确定能量特征值 E_i，这件事属于力学，特别是量子力学的課題。因此，我們可以这样讲，統計力学所从事的是利用数学来处理状态和的总和。

在計算状态和时，有二項規則，利用了它們，有时可使問題簡单化。这二項規則是

（i）如果一个体系的状态經分类后，可以分成二部分，則体系全体之状态和可以用各个部分的状态和加在一起所成的和来表示：

$$Z(T)=Z'(T)+Z''(T). \tag{1.8}$$

（ii）如果一个体系实际上是由二个体系合成的，部分体系間的相互作用可以忽視的話，則可由各个部分系之状态和所成乘积得到合成系的状态和：

$$Z(T)=Z_1(T)\cdot Z_2(T). \tag{1.9}$$

从以上二个規則看来，状态和恰好具有概率同样的性质。特别就合成体系而論，虽說部分体系間有能量的授受关系，事实上，部分体系的状态間是相关的，在概率上它們并不是独立的，但对状态和而言，恰如独立事件的概率一样地去处理就成了。

合成系的能量 E 是部分系的能量 $E^{(1)}$，$E^{(2)}$ 之和，如注意到指数函数的相乘：$\exp(-E/kT)=\exp(-E^{(1)}/kT)\exp(-E^{(2)}/kT)$，則(1.9)馬上就可推导出来。

在处理所謂**理想气体**以及其他理想体系时，規則(1.9)肯定地是一項有力的武器。理想气体是分子的集合，它是这样一种体系：对于分子本身具有的能量而論，可以忽視分子間相互作用的能量。这时如果多次地使用規則(1.9)，則含有 N 个分子的气体，其全体之状态和 $Z^{(N)}$ 就是一个分子的状态和 $Z^{(1)}$ 的 N 乘方：

$$Z^{(N)}(T)=[Z^{(1)}(T)]^N. \tag{1.10}$$

这里，即使分子总数 N 是 Avogadro 数 6.02×10^{23} 这样程度的大数，求状态和时，也并不費很大的事。

即使体系各分子間的相互作用是显著的，由于改变一下看法，有时可以把原体系当作一种理想体系来考虑。例如，研究晶体格

子的热运动时，虽說分子間的相互作用很显著，不能忽視，但根据微小振动理論，仅限于靠近晶体格子平衡点的运动而論，它可以看成标准振动形态的重合，因此，不妨当做独立振动系的合成去处理。

但是还有这样的体系，无論怎样改变看法，总不能看成理想体系或其近似的体系。单糾纏在这种体系的处理方法，因为沒有好办法，就說搞不好是不对的，事实上这体系在本质上是和理想体系有差异的。到底所謂本质上的差异从何处体現出来？首先出現在热容量的异常現象。

根据公式(1.4)，热容量 C 是状态和的对数經二回微分得出的。如果体系是理想体系，状态和采取(1.10)的形式，应看成∞的大数 N 使得全体成为这样的大数，这时提出 C 的函数形式成为沒有意义，因此，只有在有限的 $Z^{(1)}(T)$ 时 C 的函数形式才可确定。由于 $Z^{(1)}(T)$ 单是指数函数的和(卽使是无穷項的和，但通常是收斂的)，而指数函数的解析性质是已知的，它的变化是平稳的。

但是实际的物质体系，其热容量作为温度的函数而論，出現奇异点的情况并不算少。

有关这种奇异点所熟知的例子，有随伴着融解或蒸发(所謂**相轉移**)的潛热現象。在进行融解或蒸发时，由于加热而体系的温度不变，所以可倒过来讲，体系的内部能量 E 作为温度的函数看待是阶段上升的，由 E 經微分而得的热容量 C 呈現出 δ–函数❶的奇异点。

較近发現的热容量之奇异性和上述 δ–函数的变化比較起来是略为平穩的，有时在某一温度热容量曲綫的变化是急遽上升，过

❶ δ-函数 $\delta(x)$ 按照函数的正規意义讲来，并不是眞正的函数，它是为了应用上的便利，作为使用的一种工具而已。首先是由 Dirac 使用的，形式上，它当做不連續函数 $\varepsilon(x)$ 的导函数而規定的，这里的 $\varepsilon(x)$ 满足 $\varepsilon(x)=0$ $(x<0)$，$\varepsilon(x)=1$ $(x\geqslant 0)$，可以考虑到 $\delta(x)$ 在 $x=0$ 时是 ∞，在其他各处取 0 值。——譯者注

此以后，突然地降落下来，这种现象主要从固体的观测中得到。最明显的例子是强磁性体靠近 Curie 点❶的热容量之异常性。就鉄 Fe 来讲，其 Curie 点在 1043°K（=770°C），超过这温度鉄的强磁性质就失去，同时在这一温度上，比热的异常现象就出現如上述的情况。另一个典型的例子是出現在黄銅的比热之异常現象。銅 Cu 与鋅 Zn 以一原子对一原子的比例所合成的 β–黄銅❷，其热容量作为温度的函数看待时，在 730°K 处发生上述意义的异常現象。根据 X–射綫的繞射研究知道这种异常現象是由于在合金的晶格上出現銅原子与鋅原子交互排列的**有秩序状态**与**无秩序状态**的交替而引起的。

这种热容量曲綫的异常現象，其形象有如希腊字母 λ，总称之为 λ–現象。这种曲綫的异常性就数学而論到底是怎样一回事？其突起之处是否无穷尽地延伸出去？或者是虽有突起之处，但是有限的，只不过存在着有限的出入？这些問題根据实驗还不能明白地解答。无論是怎样一种情况，对于象蒸发那样有关潜热的第一种相变化，我們称这种有关热容量异常性的相变化为第二种相变化。

第一种相变化也好，第二种相变化也好，反正具有象热容量之奇异点的那些体系不是理想体系。那是由于某种分子間的强相互作用所引起的，不能从近似于理想体系的出发点去进行討論。这时的現象应該說是相互作用成为主要的因素，一个分子的状态变化时，通过相互作用引起其他分子的状态变化，由于这种变化的傳遞，最后引起物质全体的显著的变化，随着这样的变化可以想象到有許多能量被吸收了。这种現象总称之为**协調現象**（cooperative phenomena）。

❶ 所謂 Curie 点即磁性变态点。——譯者注

❷ 呈現变态性质的一种黄銅。——譯者注

說明协調現象的理論，完全不能使用有关状态和之乘积定理，因此，在数学上是一桩困难的事。但是在十几年前，久保亮五，Kramers-Wannier 等人为了处理結晶的統計力学，創立了'矩陣方法'与'特征值問題的方法'，总算有了解决問題的数学工具，L. Onsager 在这基础上，成功地求得了象平面四角晶格的 Ising 模型这类特殊問題的严密解。原作者(指伏見康治，庄司一郎)以及 Houtapfel，Temperley 等人对于不同的晶体格子型处理了类似的問題。还有 Kac 与 Ward 对于四角格子的問題在采用的方法上和上述諸人完全不同，利用組合論的方法求解，达到了同样的結果。

以上是在不考虑外部磁場的情况下求解的，对于外部磁場的强度 $\mathfrak{H}$ 是有限的情形，問題就变得非常复杂，还不能求解。然而对于强磁性物质的特性，自发磁性，亦即把外部磁場的强度当做 0 时所殘留下来的磁矩

$$I = \lim_{\mathfrak{H}\to 0} kT \frac{\partial \log Z(T)}{\partial \mathfrak{H}},$$

利用攝动論的方法，C. N. Yang (譯者按：即楊振宁) 把它求出来了。其論述是非常复杂的，本书内无法提到，但結果是非常簡单的。注意到这种簡单性，Potts 从对称性的考虑出发，把这項結果扩充到三角格子，納(譯者注：日本人名)更扩充到蜂巢格子(按即六角格子)以及如籠眼型的平面晶格，获得了圓满的結果。

§2 Ising 模型，矩陣方法，一維結晶

以下的討論完全是关于强磁性体的 Ising 模型，首先，对它进行說明。

为了說明物质的强磁性，有 Heisenberg 的学說，就簡单情况加以叙述，則先假定晶格各格子点上的原子分别具有自旋(spin)。

自旋可用 2 行 2 列的矩陣向量 $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 来表示：

$$\sigma_x^2=\sigma_y^2=\sigma_z^2=1,\ \sigma_x\sigma_y=i\sigma_z,\ \sigma_y\sigma_z=i\sigma_x,\ \sigma_z\sigma_x=i\sigma_y,$$

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\ \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\ \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{2.1}$$

作为晶格全体的自旋系所具有的能量，可考虑形式

$$H=-\sum_{\langle ij\rangle}J_{ij}\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_j. \tag{2.2}$$

$\boldsymbol{\sigma}_i$ 是第 i 个格子点原子的自旋量，J_{ij} 被称为作用于 i 原子和 j 原子間的**变換能量**。由于在多数情况下，只有直接相邻的原子間才有 J_{ij}，所以上述的 H 式内的总和是对于一切相邻的原子对进行的。此外，对于从外部以磁場 $\mathfrak{H}$ 沿 z 方向作用于物体的情况，则上述的 Hamilton 函数可扩充为形式

$$H=-\sum_{\langle ij\rangle}J_{ij}\boldsymbol{\sigma}_i\cdot\boldsymbol{\sigma}_j-\nu\mathfrak{H}\sum_i\sigma_{zi}. \tag{2.3}$$

无論是那一种 Hamilton 函数，要严密地求其特征值，是非常困难的。在有 N 个原子存在的情况下，必须把 2 行 2 列的矩陣代数改变成 N 个直积所成的复杂代数去处理。

虽說上述的 Heisenberg 学說已經把問題簡单化了，而且构成一个模型，但 Ising 模型把問題更簡化了。它是这样的：把量子力学的变量 $\boldsymbol{\sigma}$（即矩陣量）用古典的变数 μ 去代换。不过这时要假定 $\boldsymbol{\sigma}$ 之 z 支量 σ_z 的特征值相当于 ±1，μ 是只有二个数值 $+1$ 与 -1 的变数。这时，为了說明自旋間相互作用的項，让我們只取出一对自旋来考虑。

$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ 之特征值是 1 与 -3，前者是三重簡并，后者是一重簡并。如用通俗的話来讲，前者相当于二个自旋处于平行的情况，后者相当于自旋处于逆平行、整个自旋成为 0 的情况。使用古典的自旋变数 μ_1 与 μ_2，相互作用的項以 $-J\mu_1\mu_2$ 表示，这就是 Ising 模型，这个 $\mu_1\mu_2$ 之"特征值"是 $+1$ 和 -1，其統計权重同为 2(μ_1

$=\mu_2=1$ 或 $\mu_1=\mu_2=-1$ 时，$\mu_1\mu_2=+1$；$\mu_1=-\mu_2=1$ 或 $\mu_1=-\mu_2=-1$ 时，$\mu_1\mu_2=-1$)．因此，就特征值的全体而論，其个数以及特征值的先驗(a priori)平均值在 Heisenberg 学説与 Ising 学説看来是相同的，但就个别的特征值而論，两种説法間有相当的差别。如果同时考虑一对以上的交互作用，則由于大体上不是交换的原故，討論是非常繁难的，不能对两学説进行簡单的比較。

假設我們容許如上述那样和"真实"的理論略有一点差距的説法，則在 Ising 模型里假定强磁性体的能量采取形式

$$E(\cdots\mu_i\cdots)=-J\sum_{\langle ij\rangle}\mu_i\mu_j-\nu\mathfrak{H}\sum_i\mu_i. \tag{2.4}$$

第一总和是就所有的相邻原子而言，所有的 μ_i 是任意独立地取 ±1 这两个数值。因此，在 Ising 模型里，Hamilton 函数的特征值問題是解决了，剩下的問題是关于如何实际进行統計力学状态和的总和

$$Z(T)=\sum_{(\mu=\pm1)}\exp(-E\{\mu\}/kT). \tag{2.5}$$

其次試討論所謂的一維物质。这是通过某一单位胞返复运行构成一維联系的东西。表示一个单位力学系之状态的变数(不一定考虑 Ising 模型)記作 x．因此，这单位系的能量自然可看成 x 的函数而写为 $E(x)$．相邻的单位系間引起的相互作用写成 $F(x_1, x_2)$，是二个变数的函数。分离的单位系間假定不发生作用。在这样的假定下，单位系由某处到某处串联而成的鎖状体系全体的能量应取如下的形式：

$$E=\cdots+E(x_1)+F(x_1, x_2)+E(x_2)+F(x_2, x_3)+\cdots. \tag{2.6}$$

把它写在指数函数的右肩上，对各 x 进行总和就求得了状态和。

这时如果 x 是 x_2，就关于 x_2 进行求和，我們注意到含有 x_2 的項数明显地很少。因此如令

$$M(x_2, x_3)=\exp\left\{-\frac{E(x_2)+F(x_2, x_3)}{kT}\right\}, \tag{2.7}$$

則所求的状态和有形式

$$Z=\sum_{x_1x_2\cdots}\cdots M(x_1,\ x_2)M(x_2,\ x_3)M(x_3,\ x_4)\cdots. \qquad (2.8)$$

这就是說，如果把 $M(x',x'')$ 看成是 x' 和 x'' 所构成的矩陣元素，那么，状态和之总和与矩陣乘法里出現的总和是同样性质的。为了在表面上看出計算处理的技巧而并不影响到本质，我們把一維物质的头和尾連串起来組成环状形态来处理。

这样进行的話，上式最后的因子是 $M(x_n,x_1)$，而 Z 可写成

$$Z=\mathrm{Trace}(M^n). \qquad (2.9)$$

这里的 M 是以 $M(x_1,\ x_2)$ 等作为元素的矩陣，M^n 是在矩陣乘法的意义上所构成的 n 乘方，还有符号 Trace 表示迹，那就是矩陣的对角元素之和。

采取了如上的形式，那么，无論 n 有多大，Z 之計算不会是困难的。具体地讲，如把 M 化为对角矩陣

$$S^{-1}MS=\begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots\\ 0 & 0 & \lambda_3 & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix},$$

根据迹的对称性，有

$$Z=\mathrm{Trace}((S^{-1}MS)^n)=\mathrm{Trace}\begin{pmatrix}\lambda_1^n & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & \lambda_2^n & 0 & \cdots\\ 0 & 0 & \lambda_3^n & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}$$

$$=\lambda_1^n+\lambda_2^n+\lambda_3^n+\cdots. \qquad (2.10)$$

如把 M 的特征值中最大的記作 λ_1，在 $n\to\infty$ 时，Z 可估計为

$$Z\simeq\lambda_1^n. \qquad (2.11)$$

因此，問題归結为求 M 的最大特征值。

上面所写的 M 并不是对称矩陣，但使它对称化也很簡单；把

$$\exp\left[-\left\{\frac{1}{2}E(x_1)+F(x_1,\ x_2)+\frac{1}{2}E(x_2)\right\}\Big/kT\right] \qquad (2.12)$$

考虑成 $M(x_1, x_2)$ 这样的矩陣元素就可以了。因此，M 的特征值問題一定是可解决的。

現在我們試以这种'矩陣方法'适用于原子排成一列、各原子的自旋变数是 μ 的情况。对于 $\mu_1, \mu_2=\pm1$，考虑以

$$M(\mu_1, \mu_2)=\exp(h\mu_1+H\mu_1\mu_2),\text{这里的}\ h=\frac{\nu\mathfrak{H}}{kT},\ H=\frac{J}{kT}$$

作为元素的矩陣。詳細写出的話，那就是

$$M=\begin{pmatrix} M(+1, +1) & M(+1, -1) \\ M(-1, +1) & M(-1, -1) \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} e^{h+H} & e^{h-H} \\ e^{-h-H} & e^{-h+H} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} e^{h} & 0 \\ 0 & e^{-h} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{H} & e^{-H} \\ e^{-H} & e^{H} \end{pmatrix}. \tag{2.13}$$

特征方程是

$$\begin{vmatrix} e^{h+H}-\lambda & e^{h-H} \\ e^{-h-H} & e^{-h-H}-\lambda \end{vmatrix}=0,$$

其較大的特征根是

$$\lambda_1=e^{H}\cdot\cosh(h)+\sqrt{e^{2H}\cosh^2(h)-2\sinh(2H)}$$
$$=e^{H}\cosh(h)+\sqrt{e^{2H}\sinh^2(h)-e^{-2H}}.$$

这式的 n 乘方就是状态和 Z。因此，这种一維磁性体的能量与磁距是可以計算的：

$$E=-n\frac{\partial\log\lambda_1}{\partial(1/kT)}=-nJ\frac{\partial\log\lambda_1}{\partial H}-n\nu\mathfrak{H}\frac{\partial\log\lambda_1}{\partial h}, \tag{2.14}$$

$$M=+nkT\frac{\partial\log\lambda_1}{\partial\mathfrak{H}}=n\nu\frac{\partial\log\lambda_1}{\partial h}$$
$$=n\nu\frac{\sinh(h)}{\sqrt{\sinh^2(h)+e^{-4H}}}. \tag{2.15}$$

为了以后处理更复杂情况的方便起見，我們引进两个作用于 μ 之函数的运算子：

$$(Cf)(\mu)=f(-\mu),\quad(sf)(\mu)=\mu f(\mu). \tag{2.16}$$

这些运算子如用矩陣表示的話,則可写成

$$C=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad s=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}. \tag{2.17}$$

由于有

$$C^2=\mathbf{1},\ s^2=1,\ Cs=-sC \tag{2.18}$$

的原故,所以 1, s, C, isC 构成和 Hamilton 四元数或 Pauli 之自旋矩陣 1, σ_z, σ_x, σ_y 完全同构的代数之基底。使用了这样两个矩陣,則前面出現过的矩陣可写成如下的形式:

$$\begin{pmatrix}e^h & 0\\ 0 & e^{-h}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cosh(h)+\sinh(h) & 0\\ 0 & \cosh(h)-\sinh(h)\end{pmatrix}$$

$$=1\cdot\cosh(h)+s\cdot\sinh(h)=\exp(hs), \tag{2.19}$$

$$\begin{pmatrix}e^H & e^{-H}\\ e^{-H} & e^H\end{pmatrix}=1\cdot e^H+C\cdot e^{-H}$$

$$=\{2\sinh(2H)\}^{1/2}\cdot[\cosh(H^*)+C\sinh(H^*)]$$

$$=\{2\sinh(2H)\}^{1/2}\exp(H^*C), \tag{2.20}$$

但

$$\sinh(2H)\cdot\sinh(2H^*)=1,\ e^{-2H}=\tanh(H^*),$$

$$e^{-2H^*}=\tanh(H). \tag{2.21}$$

因此,在我們所考慮的特征值問題里出現的矩陣 M 可写为

$$M=(2\sinh(2H))^{1/2}\exp(hs)\cdot\exp(H^*C)$$

$$=(2\sinh(2H))^{1/2}\cdot M'.$$

这里的 M' 可以表示成一个指数函数的形式。事实上,

$$M'=(\cosh(h)+\sinh(h)s)(\cosh(H^*)+\sinh(H^*)C)$$

$$=\cosh(h)\cosh(H^*)+\sinh(h)\cosh(H^*)s$$

$$+\cosh(h)\sinh(H^*)C+\sinh(h)\sinh(H^*)sC$$

$$=\cosh(\Gamma)+\sinh(\Gamma)\cdot[\alpha s+\beta C+i\gamma sC],$$

但这里

$$\cosh\Gamma=\cosh h\cdot\cosh H^*,$$

$$\sinh\Gamma\cdot\alpha=\sinh h\cdot\cosh H^*,$$

$$\sinh \Gamma \cdot \beta = \cosh h \cdot \sinh H^*,$$
$$i \sinh \Gamma \cdot \gamma = \sinh h \cdot \sinh H^*.$$

我們知道 Hamilton 的四元数是为了表現剛体的旋轉而引进的，如果把 s, C, isC 考虑成三維空間的直交軸，那么，上面的式子就表示了如下的事实：圍繞 s 軸旋轉一个虚角 $2hi$，再圍繞 C 軸轉虚角 $2H^*i$，其結果和圍繞 $\alpha s+\beta C+\gamma(isC)$ 所成的方向轉一个虚角 $2i\Gamma$ 是一样的。

由于 $(\alpha s+\beta C+i\gamma sC)^2=1$，$M'$ 之特征值是 $\exp(\pm\Gamma)$，所求的最大特征值 λ_1 是

$$\lambda_1=(2\sinh(2H))^{1/2}\exp\Gamma.$$

容易驗証出，这个結果和以前求得的結果是一致的。

特别当外部磁場是 0，$h=0$ 的情况下，

$$\lambda_1=(2\sinh(2H))^{1/2}e^{H^*}=2\cosh(H),$$

$$\log\left(\frac{\lambda_1}{2}\right)=\log\cosh(H)$$
$$=\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi \log[\cosh 2H-\sinh 2H\cos\omega]d\omega, \quad (2.22)$$

这个結果和以后要提到的 2 維晶格的情况相比較是值得注意的。

无論怎样讲，当原子如鎖状地排成一列时，其 Ising 模型中，Z 表現成解析函数 λ_1 的 n 乘方形式，和§1 提到的理想体系是相同的，因而热容量以及其他热力学的量不能期望其具有不連續性，协調現象也不見得会发生。可以預想到，設一維物质內某一原子的左方有某种使向上的自旋起作用的措施，只有通过該原子本身才可以把那效果影响及于右方，右方的情况为一个原子的搖摆不定性所支配着，因此，自旋序列无法向右方进行傳播。与此相反，在二維(或高維)晶格的情况下，一个原子的搖摆性为同列的其他原子的自旋影响所抑压，左方的自旋影响向右方傳播不会受到原子不定性的阻碍，因而，可以想象到这时会发生协調現象。

第2章　表里变换，Y-Δ 变换

§3 表 里 变 换

正如前章提到的那样，如要討論相变化，非处理二維以上的晶体不可。只有关于 Ising 模型，二維的問題才有严密的解答。

在进行这方面的說明前，試先說明 Kramers-Wannier 的里格子概念。这里并未給定状态和这样一种东西，但不妨假定只存在一个状态和，那么，轉移温度（Curie 点）可以正式地計算出来。原格子的格子点以圈○表示，引实綫表示格子点間的作用。这样做的話，平面为全等的四角形、三角形或六角形所嵌鑲而成的晶格結构分别称为四角格子、三角格子或蜂巢格子。

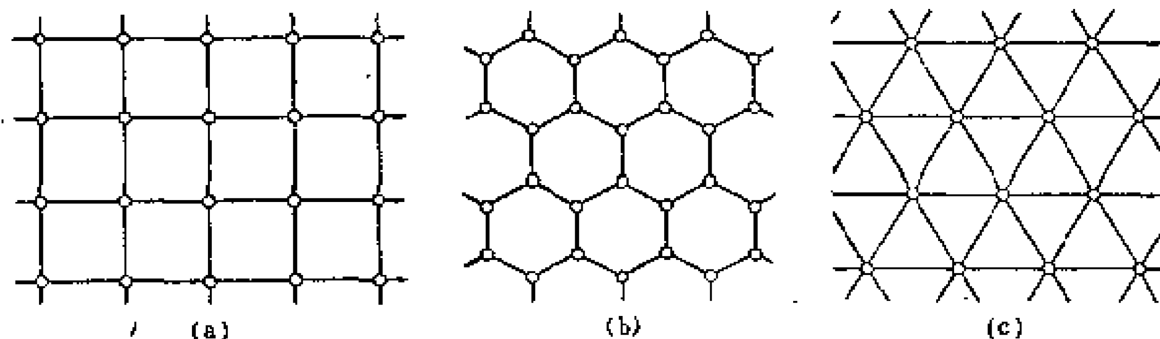


图 3.1　(a)四角格子，(b)蜂巢格子，(c)三角格子

在这种作用綫圍成的最小多角形之中央置以格子点×，用虚綫所成的作用綫把它們連結起来，使虚綫和原格子的作用綫（实綫）常保持相交，象这样构成的格子称为里格子。

四角格子的里格子仍为四角格子，三角格子的里格子为蜂巢格子，反之，蜂巢格子的里格子是三角格子，这些事实从图上就可看出。也就是說，表里关系是相互轉換的。設格子点 i 的原子自旋变数为 μ_i，与原格子有关的状态和是

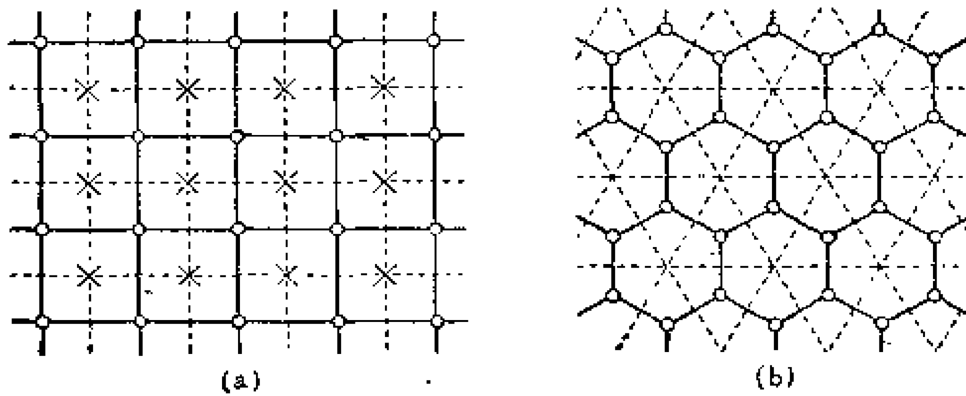


图 3.2

$$Z(T)=\sum_{\mu_1=\pm1}\cdots\sum_{\mu_N=\pm1}\exp(H\sum_{\langle i,k\rangle}\mu_i\mu_k). \qquad (3.1)$$

这里 N 是原子总数，$\sum_{\langle i,k\rangle}$ 意味着关于相邻的（即作用綫連結的）原子的总和。若干个形式为 $e^{H\mu\mu'}$ 的因子連乘，然后再取总和，就得到状态和。μ, μ' 是相邻原子的自旋变数，且 $\mu=\pm1$, $\mu'=\pm1$.

由于 $(\mu\mu')^2=1$，我們把 $e^{H\mu\mu'}$ 展开得

$$e^{H\mu\mu'}=\cosh H+\mu\mu'\sinh H,$$

又可改写成

$$e^{H\mu\mu'}=\left(\frac{1}{2}\sinh 2H\right)^{1/2}(e^{H^*}+\mu\mu'e^{-H^*}). \qquad (3.2)$$

这里引进的 H^* 以关系

$$e^{2H^*}=\coth H$$

和 H 联系起来，这和(2.21)里引进的 H^* 是完全一样的。亦即 H^* 与 H 之間有如下的关系联系着：

$$\sinh 2H\cdot\sinh 2H^*=\cosh 2H\cdot\tanh 2H^*$$
$$=\cosh 2H^*\tanh 2H=1. \qquad (3.3)$$

如把 $e^{H\mu\mu'}$ 写成形式(3.2)，则状态和的表达形式是

$$Z(T)=(\sinh 2H/2)^{S/2}\sum_{\mu_1=\pm1}\cdots\sum_{\mu_N=\pm1}\prod_{r=1}^{S}(e^{H^*}+\mu_r\mu_r'e^{-H^*}).$$

这里的 r 表示作用綫的号碼，其总数为 S. 这式中的乘积展开时，

每項出現若干个 $\mu_r\mu'_r$ 之积，这相当于图上的若干条作用綫。这些作用綫构成一个图形。从一个格子点如有奇数条作用綫分出去，那么，和这些格子点有关的 μ 就数值 ±1 加在一起而消尽。因此，对我們有兴趣的图形是閉多角形或其集合，如图 3.3 所示。

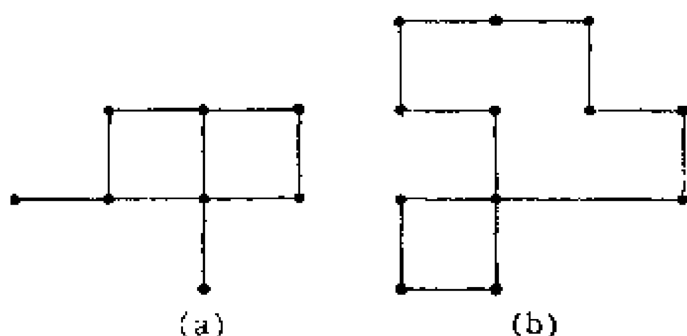


图 3.3 (a)不起作用的图形，(b)起作用的图形

現在让我們对格子作有关拓扑学的規定。假定我們討論的格子可張貼在球面上，也就是說，假定它是 1 重連結的。至于正多面体以外的有限格子，譬如四角格子，若是不在某处破坏了它的形状就不能实現这种假定，但是这也无妨，因为只要在无限伸延的全平面上来考虑，自然它仍可看作是 1 重連結的。在 1 重連結的区域内，封閉的多边形把平面分成内外二个部分区域。

相当于閉多边形的各項，对于每一条边給出 e^{-H^*}，其他結合綫則給出 e^{H^*}. 假設閉多边形或其集合含有 t 条作用綫，和这些条作用綫对应的項是 $e^{(S-t)H^*}\cdot e^{-tH^*}$.

但 $e^{(S-t)H^*}\cdot e^{-tH^*}$ 在某些时候可看做是状态和中的一項，可以写成

$$\exp H^* \sum \nu_r \nu'_r.$$

所說的某些时候，指的是在里格子上，多边形内部的格子点附以正自旋；外部的格子点附以負自旋，相互作用的参数当作 H^*. 这是由于交于多边形各边的里格子之作用綫附与以 e^{-H^*}，而对于其他作用綫附与以 e^{H^*} 的原故。

要求出 Z 之展开式内所有各項，只要关于里格子的自旋之所有配列进行总和就成。在总和时，这种情况也在包括之列，卽对于

多边形内部的点附与以负的自旋，外部的点附与以正的自旋，所以，里格子之状态和 Z^* 除以2卽可。相当于殘余的多边形之各項跟 μ 无关，所以就 μ 进行总和时，应得到 2^N 倍。总之，表里格子之状态和間有如下的关系：

$$Z(H)=2^{N-1-S/2}(\sinh 2H)^{S/2}Z^*(H^*).$$

Z 是絕对温度 T 的函数，通过关系 $H=J/kT$，Z 就可以当作 H 之函数而写做 $Z(H)$。当 J 一定时，H 以温度作为表达参数；当温度一定时，H 以相互作用之强度作为表达参数。

由于我們的格子可以張貼在球面上这样一个假定，根据正多面体之頂点数 N，面数 N^* 与棱数 S 間的 Euler 定理，知有关系

$$N+N^*=S+2,$$

利用这項关系就可把前一式写成对称的形式：

$$\frac{Z(H)}{2^{N/2}(\cosh 2H)^{S/2}}=\frac{Z^*(H^*)}{2^{N^*/2}(\cosh 2H^*)^{S/2}}. \tag{3.4}$$

对于无限延伸的晶体，有 $N+N^*=S$，所以

$$\frac{Z(H)}{2^{N/2}(\sinh 2H)^{N/2}}=\frac{Z^*(H^*)}{2^{N^*/2}(\sinh 2H^*)^{N^*/2}}. \tag{3.5}$$

这項关系式是联系互为表里的两种格子之状态和的。所謂互为表里的两种格子，例如四角格子与四角格子，三角格子与蜂巢格子，还有后面将提到的籠眼格子与骰子型格子等就是。特别对四角格子而論，由于其里格子仍为四角格子的原故，Z 和 Z^* 应具有相同的函数形式，于是上述的表里关系可以看做是同一函数对应于 $T=J/kH$ 和 $T^*=J/kH^*$ 之値，其間之結合关系式❶为

$$\frac{Z_s(H)}{(\sinh 2H)^{N/2}}=\frac{Z_s(H^*)}{(\sinh 2H^*)^{N/2}}. \tag{3.6}$$

如果对应于 T 的状态和显示某种奇异性的話，則对应于 T^* 的

---

❶ 这式对于 Z_s 讲来，可看做一个函数方程，但仅有此式，不能确定 Z_s 之函数形式。

状态和也非显示同样的奇异性不可。因此，如只假定有一个奇异点，那么，它一定是满足 $T=T^*$，亦即 $H=H^*$ 的温度，把这条件代进(3.3)，有

$$\sinh 2H_c=1, \quad H_c=0.4407. \tag{3.7}$$

这样就給出了四角格子的奇异点(在轉移温度或强磁性体的情况下，就是 Curie 温度)。在这一点上，实际四角格子的比热是按照对数形式趋于无限大，这从后面提到的严密解就可看出。

§4 Y-Δ 变 换

一个蜂巢格子和另一个蜂巢格子間要用以上同样的說法找出关系来，只靠表里变换是不可能的。这时，用得着一种新的变换叫做 Y-Δ 变换，这是联系蜂巢格子和三角格子的状态和的。

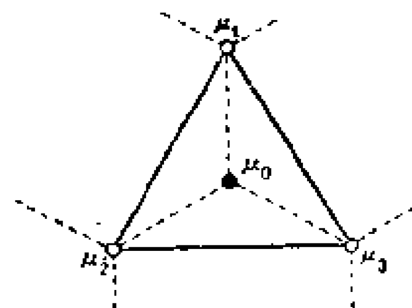


图 4.1 Y-Δ 变 换

蜂巢格子的一个格子点具有三个相邻的格子点，中央点的自旋变数記为 μ_0，周圍三点的自旋变数記成 μ_1，μ_2，μ_3。状态和内，含有 μ_0 的因子 $\exp(H\mu_0(\mu_1+\mu_2+\mu_3))$ 关于 $\mu_0=\pm1$ 进行总和时，有

$$2\cosh(H(\mu_1+\mu_2+\mu_3))$$
$$=\Delta(T^+)\exp(T^+(\mu_1\mu_2+\mu_2\mu_3+\mu_3\mu_1)). \tag{4.1}$$

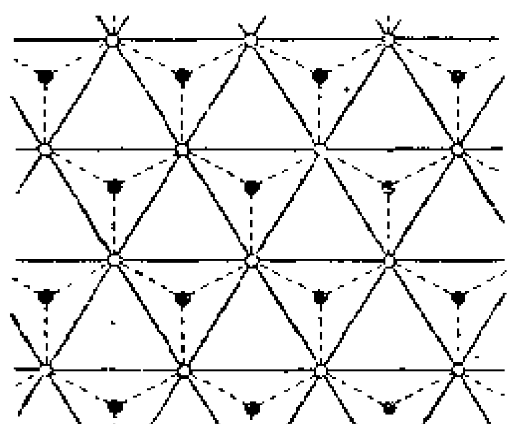
这里使用了新参数 T^+，連結周圍三点的相互作用就可以表达出来。T^+ 和 H 的关系以及 $\Delta(T^+)$ 可表示如下：

$$e^{4T^+}=2\cosh 2H-1, \tag{4.2}$$

$$\Delta(T^+)=e^{T^+}(e^{4T^+}+3)^{1/2}. \tag{4.3}$$

图 4.2 内記以 · 的点(蜂巢格子的一部分格子点)关于其自旋变数按上面那样进行总和时，其結果成为具有参数 T^+ 的三角格子。这称为 Y-Δ 变换。

蜂巢格子的状态和 $Z_h(H)$ 和三角格子的状态和 $Z_t(T^+)$ 之間以次式互相联系着：


图4.2 蜂巢→三角(Y-Δ)

$$Z_h(H) = \Delta(T^+)^{N/2} Z_t(T^+), \tag{4.4}$$

$$2\cosh 2H - 1 = e^{4T^+}. \tag{4.5}$$

这里的 N 是蜂巢格子的格子点总数。

对于三角格子再施行表里变换，则又重新得到蜂巢格子。

$$\frac{Z_t(T^+)}{(2\sinh 2T^+)^{N^*/2}} = \frac{Z_h(H^+)}{(2\sinh 2H^+)^{N/2}}. \tag{4.6}$$

这里 T^+ 与 H^+ 是表和里两种格子的参数，且有关系 $\sinh 2T^+ \cdot \sinh 2H^+ = 1$. N^* 是三角格子的格子点总数，有关系 $N^* = 2N$. 原来的蜂巢格子經 Y-Δ 与表里两种变换再变到蜂巢格子，其状态和間成立着下面的关系：

$$\frac{Z_h(H)}{(\sinh 2H)^{N/2}} = \frac{Z_h(H^+)}{(\sinh 2H^+)^{N/2}}. \tag{4.7}$$

参数 H 和 H^+ 間有对称关系：

$$(\cosh 2H - 1)(\cosh 2H^+ - 1) = 1. \tag{4.8}$$

根据以前同样的說法，如果只有一个奇异点的話，这是满足 $H = H^+$ 的点，有

$$\cosh 2H_c = 1, \quad H_c = 0.6585. \tag{4.9}$$

这就是蜂巢格子的轉移温度。如对于三角格子进行同样討論，则首先由表里变换把参数 T（和絕对温度的記号相同，但不应混同起来）的三角格子轉移到参数 H 的蜂巢格子，再由 Y-Δ 变换轉移到参数 T^+ 的三角格子就成了。結果是，在这两种三角格子間有关系

$$\frac{Z_t(T)}{(2\sinh 2T)^{N^*/2}} = \frac{Z_t(T^+)}{(2\sinh 2T^+)^{N^*/2}}, \tag{4.10}$$

$$(e^{4T}-1)(e^{4T^+}-1)=4, \tag{4.11}$$

轉移温度由 $T=T^+$，亦卽

$$e^{1/T_c}=3, \quad T_c=0.2747 \tag{4.12}$$

所給定。这些变换以及格子間的轉变可用图 4.3 表示出来。

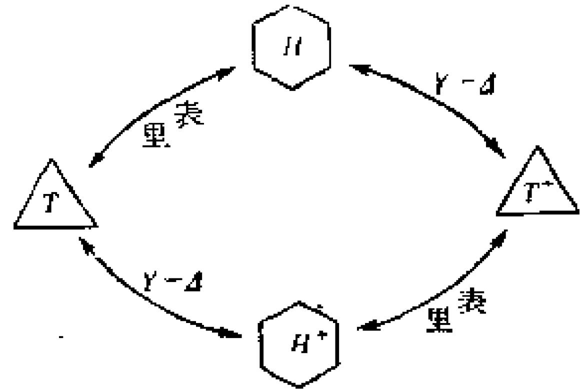


图 4.3

让我們再回顾一下三种格子型。首先从一个原子的相邻原子数目来看，蜂巢格子是 3，四角格子是 4，三角格子是 6。对此，轉移温度与之相应地增高(温度的倒数如为 H_c 与 T_c，則相应减小)。相邻原子的个数越多，彼此間的相互作用越紧密，在这意义下，当高温度时，晶体内的秩序被保持是可以理解到的。

表达轉移温度的式子可归結为

$$\mathrm{gd}(2H)=\pi/c. \tag{4.13}$$

c 是相邻原子的数目，Gudermann 角由

$$\mathrm{gd}\,x=2\tan^{-1}(e^x)-\pi/2$$

規定出。这种表达式是偶然的产物，抑或另有其他理由，还不知道。

§5 籠眼格子

平面以全等的正多边形填充的格子結构，到目前为止提到的是蜂巢、四角与三角格子，对这些格子来讲，各格子点全都是同等的，各边也全是同等的。

标題揭示的籠眼格子，其形象有点象用篾片編出的籠子，因此有籠眼格子之称。这是合二种正多角形，卽三角形与六角形而成的，就这点看来，就和以前所讲的格子結构不同。用二种正多角形

来填充一个平面所成的格子结构，除此以外还有几种，但籠眼格子有特别值得注意的地方，那就是所有格子点是同等的，各边也全是同等的，而且相邻的原子数目和四角格子的情况一样，也是4个。这种格子的轉移温度和四角格子比較起来是高、是低，或相同，这是很有兴趣的問題。

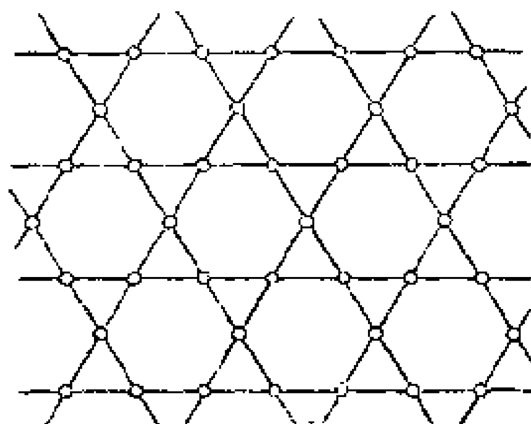


图 5.1 籠眼格子

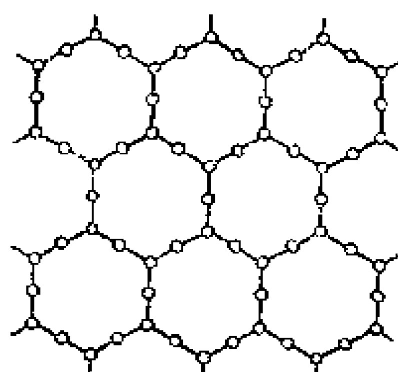


图 5.2 加工的蜂巢格子

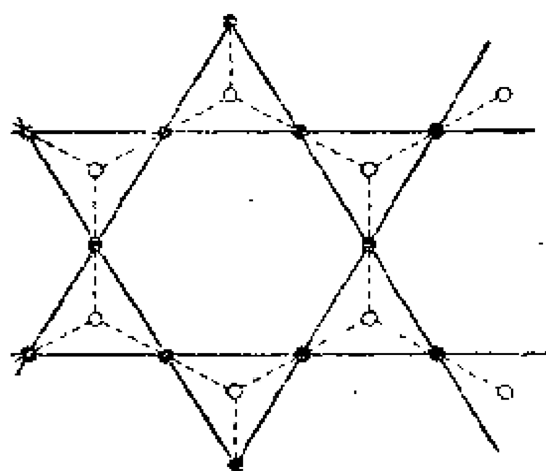


图 5.3

首先作为出发点的是"加工的蜂巢格子"。那就是在蜂巢格子的每一边之中点置以多余的原子所成的格子。

对于这种加工的蜂巢格子的状态和，就頂点之自旋变数进行总和时，即得到籠眼格子的状态和 $Z_k(K)$，也就是 Y-Δ 变换。

$$Z'(E) = \Delta(K)^N Z_k(K), \tag{5.1}$$

$$\left.\begin{aligned}\Delta(K) &= e^K(e^{4K}+3)^{1/2},\\ e^{4K} &= 2\cosh 2E - 1,\end{aligned}\right\} \tag{5.2}$$

此外，对于加工的蜂巢格子的状态和 $Z'(E)$，就边上之原子自旋变数进行总和时，得出形式

$$\sum_{\mu_0=\pm1} \exp(E\mu_0(\mu_1+\mu_2)) = I(H)\exp(H\mu_1\mu_2). \qquad (5.3)$$

也就是說，在 μ_0 連串着的二根作用綫变成了連結 μ_1，μ_2 的一根作用綫了。称这个为 I 变换。这里

$$I(H)=2e^{H}, \quad e^{2H}=\cosh 2E. \qquad (5.4)$$

利用这个 I 变换，从加工的蜂巢格子的状态和引来了蜂巢格子的状态和。

$$Z'(K)=I(H)^S Z_h(H). \qquad (5.5)$$

S 是蜂巢格子的边数，和顶点数 N，面数 N^* 有如下的关系：

$$S=\frac{3}{2}N=3N^*. \qquad (5.6)$$

結果，以 $Z'(E)$ 作为媒介，籠眼格子的状态和与蜂巢格子的状态和可以联系起来而有

$$\Delta(K)^N Z_k(K)=I(H)^S Z_h(H), \qquad (5.7)$$

$$e^{4K}=2e^{2H}-1. \qquad (5.8)$$

連接 I 变换与 $Y-\Delta$ 变换而成的变换称做 I-Y-Δ 变换。

如以前說的那样，設 $Z_h(H)$ 以满足 $\cosh 2H=2$ 的点当做奇异点，则和它对应的 $Z_k(K)$ 以满足

$$e^{4K_c}=3+2\sqrt{3}, \quad K_c=0.4643 \qquad (5.9)$$

的点作为奇异点。这些个奇异点完全可經严密解而驗証出来。拿

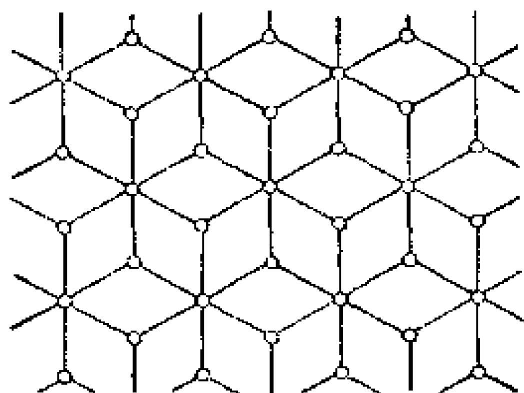


图 5.4 骰形格子

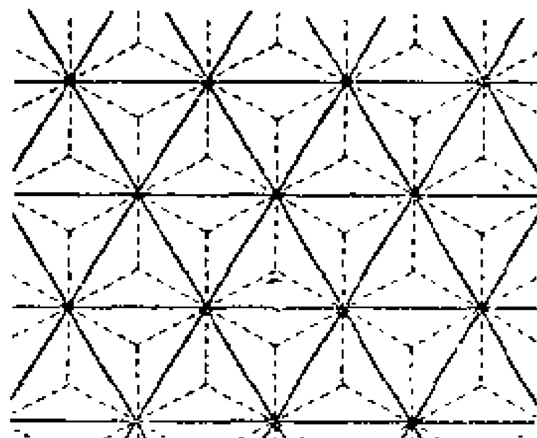


图 5.5 骰形格子→三角格子($Y-\Delta$)

它来和同样具有4个相邻原子的四角格子的奇异点(参照(3.7))

$$e^{4H_c}=3+2\sqrt{2},\quad H_c=0.4407 \tag{5.10}$$

比較，可看出稍微降低一点。这就是說，轉移溫度单凭相邻原子数是决定不出来的。

籠眼格子的里格子是骰形格子 (diced lattice)，利用 Y-Δ 变换从它可以引来三角格子。这时，注意到三角格子的作用綫从两側有其他影响(这种变换名为 Y-Δ' 变换)，所以

$$Z_d(D)=\Delta(T/2)^{2S/3}Z_t(T), \tag{5.11}$$

$$e^{2T}=2\cosh 2D-1. \tag{5.12}$$

如前节末所說，包含籠眼格子在内，格子間之变换有如图5.6所示的那种关系。在图中标出了对应于 J/kT 的参数。

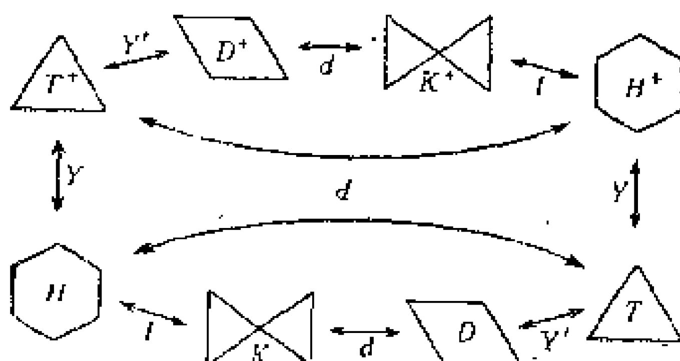


图5.6 格子間之变换

d：表里变换，Y：Y-Δ 变换，Y'：Y-Δ' 变换，I：I-Y-Δ 变换

由各种变换所引起的参数关系可总括如下：

$$\left.\begin{aligned}
&e^{4K}=2e^{2H}-1,\quad e^{4K^*}=2e^{2H^+}-1 \quad (I\text{-}Y\text{-}\Delta),\\
&e^{2D}=\coth K,\quad e^{2D^+}=\coth K^* \quad (\text{表里}),\\
&e^{2T}=2\cosh 2D-1,\quad e^{2T^+}=2\cosh 2D^+-1 \quad (Y\text{-}\Delta'),\\
&\cosh 2H^+=(e^{4T}+1)/2,\quad \cosh 2H=(e^{4T^+}+1)/2\\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (Y\text{-}\Delta).
\end{aligned}\right\} \tag{5.13}$$

从这些式子可以导出表里变换

$$e^{2H}=\coth T,\quad e^{2T^+}=\coth H^+,$$

結合同一格子型的參数之間的关系，在蜂巢格子与三角格子情形已經提到过了，籠眼、骰形格子方面，分别有

$$\left.\begin{array}{l}\coth 2K(\coth 2K-1)\coth 2K^{+}(\coth 2K^{+}-1)=1/4,\\ \cosh 2D(\cosh 2D-1)\cosh 2D^{+}(\cosh 2D^{+}-1)=1/4.\end{array}\right\} \quad (5.14)$$

狀态和之間的关系有

$$\left.\begin{array}{l}Z_k(K)f(K)=Z_k(K^{+})f(K^{+}),\\ Z_d(D)g(D)=Z_d(D^{+})g(D^{+}).\end{array}\right\} \quad (5.15)$$

但

$$f(K)=\left\{\frac{(e^{4K}+1)^{1/2}}{\cosh 2K(e^{4K}-1)}\right\}^{S/3},$$

$$g(D)=\left\{\frac{(\sinh 2D)^{4/3}(\sinh D)^{1/3}}{(\cosh 2D)^{1/6}}\right\}^{S}.$$

求骰形格子的轉移点，在(5.14)内以 $D=D^{+}$，得

$$\cosh 2D_c=(1+\sqrt{3})/2, \quad D_c=0.4157. \quad (5.16)$$

在这个骰形格子里，有些格子点的相邻原子数是3，有些是6，其比例为2对1，因此，不妨說相邻原子的平均数是4. 其轉移溫度比四角格子稍高。一般說来，在相邻原子的平均数相等时，具有稠集点❶的那一种轉移溫度要高些。也就是說，直到高溫还保持内部秩序。图5.7所表示的麻叶格子，請讀者对它进行同样討論，作为练习。

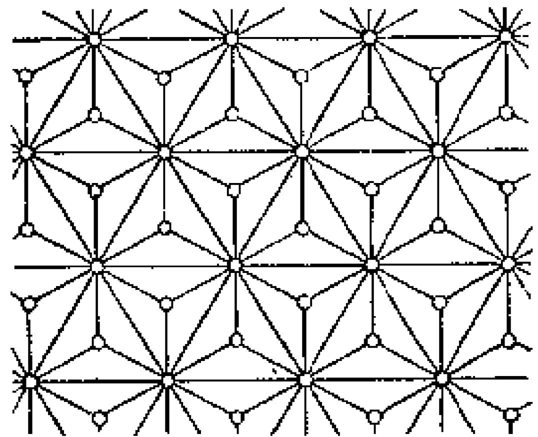


图5.7 麻叶格子($H_c=0.199$)

以上討論都是把 H, K 以及 T 这些參数当做正数来考虑的，虽說这是同种类的自旋并排时低

❶ 所謂具有稠集点指的是在某一格子型里，那些有較多的作用綫集聚在一起的点，例如說，骰形格子，相邻原子的平均数是4，但其中有些格子点，在那里有6条作用綫交会着，这就暫称之为稠集点。——譯者注

能量状态下强磁性的情况，但是当那些参数是负的时候，也不必另外去考虑。后一情况相当于不同种类的自旋并排时，低能量反强磁性。在 (3.3)，(4.8)，(4.11) 及 (5.14) 内以 $H=H^*$，$H=H^+$，$T=T^+$，$K=K^+$ 及 $K=K^+$ 代进，而在得到的式子内更以 $H\to -H$ 等轉换关系代入，有

$$\sinh^2(-2H)=1, \quad (\cosh(-2H)-1)^2=1,$$

$$(e^{-4T}-1)^2=4, \quad \coth^2(-2K)[\coth(-2K)-1]^2=1/4,$$

$$\cosh^2(-2D)[\cosh(-2D)-1]^2=1/4,$$

这些式子是作为决定轉移点而得到的式子，在四角、蜂巢、骰性格子时，实数解是存在的，但在三角以及籠眼格子的場合，实数解不存在。这由于后者「+」「−」交錯并列的秩序状态为构成图形中三角形而被破坏的原故。

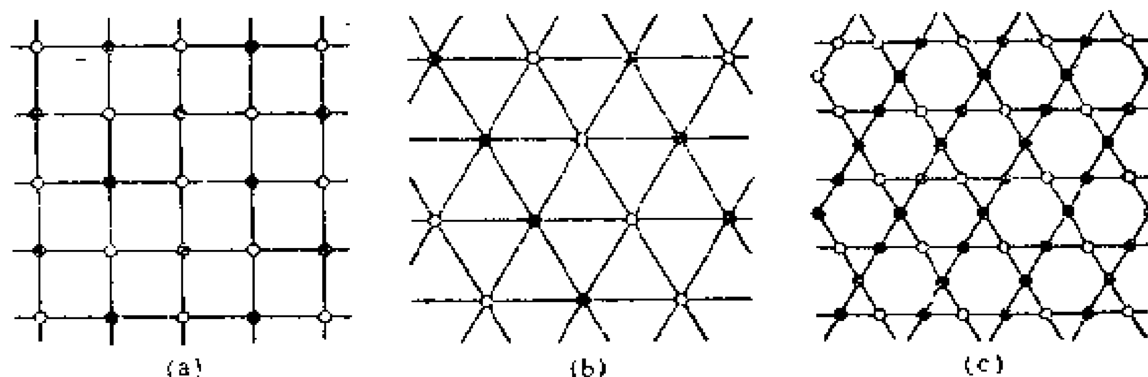


图 5.8 反强磁性与格子型

(a)在四角格子情况下，不同类的自旋原子得以交錯地排列；(b)在三角格子时，有同类的自旋原子相邻地排列着；(c)在籠眼格子时，不能排成交錯的陣形

第3章 代数的解法

§6 二維四角格子之矩陣

对于四角格子試用矩陣方法去探討。我們取竪排之n个原子作为矩陣方法里的单位系。根据实际情况，这一列的第n个原子和本列最初的原子連接起来考虑。这样做的話，可消除因两端影响而生的复杂性。与此同样的单位系向右共排成m行(m个单位系)，最初的单位系和最后的单位系仍連接起来考虑。这样就使得整个四角格子可以考虑張貼在一个救生圈上。这种区域是2重連結的，

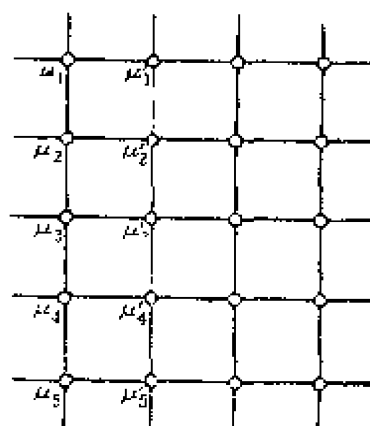


图 6.1

和前章所論的張貼在单連結域上的四角格子虽多少有些不同，但在$m\to\infty$，$n\to\infty$的极限情形，可以不考虑两端的影响。

設单位系的原子自旋变数为$\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n$，单位系的本身能量写成

$$E(\mu) = -J'(\mu_1\mu_2 + \mu_2\mu_3 + \cdots + \mu_n\mu_1). \tag{6.1}$$

相应于$\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n$的$\pm 1$数值，$\mu$共有$2^n$个状态。在这里沒有考虑外部磁場。其次，一单位系和相邻单位系間相互作用之能量写做

$$F(\mu, \mu') = -J(\mu_1\mu'_1 + \mu_2\mu'_2 + \cdots + \mu_n\mu'_n). \tag{6.2}$$

即使我們考虑到纵作用綫之强度和横作用綫之强度有区别，但并不会因此而增加問題之复杂性。这二种强度分别記作J'与J，从$J' \neq J$并不能导出特别有趣的結果。

我們是为了求特征值問題的运算子，首先，考虑与单位系的自

能有关的运算子，它是对角矩陣，矩陣元素是

$$V_1(\mu,\ \mu')=\exp H'(\mu_1\mu_2+\mu_2\mu_3+\cdots+\mu_n\mu_1)\delta(\mu_1,\ \mu_1')\cdots\delta(\mu_n,\ \mu_n'), \tag{6.3}$$

这里的 $\delta(\mu_k,\ \mu_k')$ 有如下的关系：

$$\delta(\mu_k,\ \mu_k')=\begin{cases}1 & (\mu_k=\mu_k'),\\ 0 & (\mu_k\neq\mu_k').\end{cases}$$

与相邻单位系之相互作用有关的矩陣，其矩陣元素是

$$V_2(\mu,\ \mu')=\exp H(\mu_1\mu_1'+\mu_2\mu_2'+\cdots+\mu_n\mu_n'). \tag{6.4}$$

矩陣积 V_1V_2 之矩陣元素当然是

$$\begin{aligned}V_1V_2(\mu,\ \mu')&=\sum_{\mu''}V_1(\mu,\ \mu'')V_2(\mu'',\ \mu')\\ &=\exp H'(\mu_1\mu_2+\mu_2\mu_3+\cdots+\mu_n\mu_1)\\ &\quad\times\exp H(\mu_1\mu_1'+\mu_2\mu_2'+\cdots+\mu_n\mu_n').\end{aligned} \tag{6.5}$$

状态和 Z 由

$$Z=\mathrm{Trace}(V_1V_2)^m \tag{6.6}$$

所給出。利用特征方程

$$\begin{aligned}&\sum_{\mu_1=\pm1}\cdots\sum_{\mu_n=\pm1}\exp H'(\mu_1\mu_2+\mu_2\mu_3+\cdots+\mu_n\mu_1)\\ &\quad\times\exp H(\mu_1\mu_1'+\mu_2\mu_2'+\cdots+\mu_n\mu_n')\\ &\quad\times\varphi(\mu_1',\ \mu_2',\ \cdots,\ \mu_n')=\lambda\varphi(\mu_1,\ \mu_2,\ \cdots,\ \mu_n)\end{aligned} \tag{6.7}$$

或簡写成

$$(V_1V_2,\ \varphi)=\lambda\cdot\varphi \tag{6.8}$$

的特征值 $\{\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots\}$，則 Z 可表示为

$$Z=\lambda_1^m+\lambda_2^m+\cdots. \tag{6.9}$$

我們感兴趣的是大型結晶，一单位系的状态和可写为

$$\begin{aligned}&\lim_{m\to\infty}m^{-1}\log Z\\ &=\log\lambda_{\max}+\lim_{m\to\infty}m^{-1}\log\Big[1+\sum_{j\geq2}(\lambda_j/\lambda_{\max})^m\Big].\end{aligned} \tag{6.10}$$

把絕对值最大的特征值 $\lambda_{\max}$ 找出来，λ_j 的順序按照 $\lambda_1=\lambda_{\max}$ 这样

方式編定。在 λ_{max} 非簡并时，$[\lambda_j/\lambda_{max}]<1$，$(\lambda_j/\lambda_{max})^m\to 0$，因而上式的第二項可以略去。

即使 λ_{max} 是簡并的，或者接近于 λ_{max} 的特征值有很多，只要和 m 不形成指数函数的增加形态，那么，第二項仍可以省略去。根据 Frobenius 定理，我們知道，"有限維的矩陣內，其矩陣元素全是正的时候，則最大特征值是正的、单純的，特征向量的支量全是正的(至少是同号)"。但当单位系的原子数 n 是以无限大为极限时，又将怎样的呢？在某一轉移温度以下，存在着接近于最大特征值的第二特征值，这时可以看成它們具有长距离秩序，即无限分离的原子間可看成互有关联。即使是二維格子，如不能纵横无限地延伸，我們不能期望它在本质上有和一維格子同样的相轉移。

§7 抽象代数的說法

为了使(6.5)的运算簡洁地表达起見，規定綫性运算子 s_i，C_i 由函数 $f(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_n)$ 作出新函数 s_if，C_if，这种运算子是一維情况(2.16)之扩充，

$$(s_if)(\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_i, \cdots, \mu_n)=\mu_if(\mu_1, \cdots, \mu_i, \cdots, \mu_n),$$
$$(C_if)(\mu_1, \cdots, \mu_i, \cdots, \mu_n)=f(\mu_1, \cdots, -\mu_i, \cdots, \mu_n)$$
$$(i=1, \cdots, n). \tag{7.1}$$

立刻可以看出这 $2n$ 个运算子满足如下的代数关系：

$$\begin{aligned} s_i^2 &=C_i^2=1, \quad s_iC_i=-C_is_i,\\ s_is_k &=s_ks_i, \quad\quad C_is_k=C_kC_i,\\ s_iC_k &=C_ks_i \quad\quad (i\neq k).\end{aligned} \tag{7.2}$$

利用了这些运算子，则(6.3)的对角矩陣 V_1 成为单純的乘法，簡单地可写成

$$\exp H'(s_1s_2+s_2s_3+\cdots+s_ns_1). \tag{7.3}$$

此外，(6.4)的矩陣 V_2，其各个添标 i 是分离的，每一个可用

一維时所考虑的矩陣

$$\{\exp(H\mu_i\mu_i')\} = \begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} = (2\sinh 2H)^{1/2}\exp H^*C \quad (7.4)$$

来表示，全体由这些矩陣的 n 个所成直积表示：

$$\begin{aligned} V_2 &= \begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} \times \cdots \times \begin{pmatrix} e^H & e^{-H} \\ e^{-H} & e^H \end{pmatrix} \\ &= (2\sinh 2H)^{n/2} e^{H^*C} \times e^{H^*C} \times \cdots \times e^{H^*C} \\ &= (2\sinh 2H)^{n/2} \exp H^*(C_1 + C_2 + \cdots + C_n). \end{aligned} \quad (7.5)$$

如果这里以

$$\begin{aligned} A &= s_1s_2 + s_2s_3 + \cdots + s_ns_1, \\ B &= C_1 + C_2 + \cdots + C_n, \\ V &= V_1V_2, \end{aligned} \quad (7.6)$$

则特征值問題变成了求特征方程

$$\begin{aligned} (V, \varphi) &= (V_1V_2, \varphi) \\ &= \{(2\sinh 2H)^{n/2} \exp H'A \exp H^*B, \varphi\} \\ &= \lambda \cdot \varphi \end{aligned} \quad (7.7)$$

的特征值。

§8 表里变换

試考虑由(7.2)表示的 n 組的 4 元数基底

$$\{1, s_i, C_i, is_iC_i\}.$$

每一組基底含有 4 个元素，不同組的对应的元素是可换的、无关的，而且各組共有单位元素 1，所以可作出这 n 組之 4 元数所成的直积代数。从各組取出一个元素作它們的积，全体共有 4^n 个基底元素。

4 元数构成阶数为 4 的单純代数，和 2 維的完全矩陣代数是同构的。因此，n 个元素所成的直积代数 Q^n 是阶数为 4^n 的单純

代数，和 2^n 維的完全矩陣代数同构。

运算子 V 的确是这个代数中的一个元素，而且从对称性，可以預料到它还是这个代数的子代数中的元素。

为了說明这項預料的事实，首先从(7.6)看出，$s_1, s_2, \cdots, s_n$ 一定是以两个两个的乘积而出現的。

引进使所有的自旋变数变号一回的运算子

$$\begin{aligned} &U = C_1C_2\cdots C_n, \quad U^2=1, \\ &Uf(\mu_1, \cdots, \mu_n) = f(-\mu_1, \cdots, -\mu_n), \end{aligned} \tag{8.1}$$

U 和 s_k 是反称的(逆可換的)：

$$Us_k = -s_kU, \tag{8.2}$$

从而，和任意的二次式 $s_k s_l$ 是可換的。于是它和(7.3)的 V_1 是可換的。

U 和 V_2 很明显是可換的。因此，U 和 $V=V_1V_2$ 是可換的。这就是說 V 存在于全代数 Q^n 的子代数 $[Q^n]$ 中，这个 $[Q^n]$ 是 Q^n 里面和 U 成为可換的那个部分。这个子代数 $[Q^n]$ 含有基底元素中，s_k 的偶数个之积，阶数是 $4^n/2$，剛巧是全代数 Q^n 的一半。这个 $[Q^n]$ 不是单純的。

由冪等元素 $(1+U)/2$ 及 $(1-U)/2$，$[Q^n]$ 可分解为二个子代数(理想子环)：

$$\begin{gathered} [Q^n] = Q^n_+ + Q^n_-, \\ Q^n_+ = [Q^n]\frac{1+U}{2}, \quad Q^n_- = [Q^n]\frac{1-U}{2}. \end{gathered} \tag{8.3}$$

这就是說，$\{1, U\}$ 組成半单純代数 $[Q^n]$ 的核心。子代数 Q^n_+ 和 Q^n_- 都是单純代数，其阶数同为 4^{n-1}，因而和 2^{n-1} 維的完全矩陣代数是同构的。这二个子代数各以 U 之特征值 1 或 -1 来作为标志。

上述事实如以图形表示，則如

$$\left(\begin{array}{c|c} Q^n_+ & \\ (U=1) & \\ \hline & Q^n_- \\ & (U=-1) \end{array}\right).$$

其次，让我們回过来考虑里格子。在里格子内，表格子的纵作用綫变为横的，横作用綫变成纵的就运算子的代数处理来看，这时相当于变换 $s_i s_{i+1}$ 和 C_i 之作用。事实上，这些运算子間的交换关系如果把它們写成一列

$$s_n s_1,\ C_1,\ s_1 s_2,\ C_2,\ s_2 s_3,\ \cdots,\ s_n s_{n-1},\ C_n$$

来看是容易知道的。每一运算的平方等于1，相邻的两个运算是逆可换的(反称的)，此外，任何二个是可换的。这种现象，其实是 $s_i s_{i+1}$ 和 C_i 間的本质之区别，而不是抽象代数上的差别，这由变换

$$s_i s_{i+1}\to C_i,\quad C_i\to s_{i-1}s_i\quad (i=1,2,\cdots,n)$$

并不改变代数結构就可知道。不过对于

$$(s_n s_1)(s_1 s_2)(s_2 s_3)\cdots(s_{n-1}s_n)=1,$$

$$C_1C_2C_3\cdots C_n=U$$

不一定等于1，因此，这时非限于使 $U=1$ 成立的子代数，亦即 Q^n_+ 不可。

对于 Q^n_+ 而論，上述的变换构成一个自同构对应。特别有 $A\to B$，$B\to A$. 完全矩陣代数之自同构对应仅限于内部自同构对应

$$a\to a'=SaS^{-1},$$

由于有这样一个定理，所以虽交换 A 与 B，其組合而成的某种运算子的特征值并不改变。这是由于利用某一元素 S 引起的相似变换具有形式

$$S(1+U)\exp(H'A)\exp(H^*B)S^{-1}$$
$$=(1+U)\exp(H'B)\exp(H^*A),$$

而相似变换使特征值不变是大家都知道的事情。

$1+U$ 是为了 Q^n 内的运算子射影到 Q^n_+ 上而乘上去的射影运算子。轉置矩陣的特征值和原矩陣的特征值是相等的，所以上式右边的轉置矩陣

$$(1+U)\exp(H^*A)\exp(H'B)$$

和原来的

$$(1+U)\exp(H'A)\exp(H^*B),$$

其特征值是相等的。

如就 V 进行比較，则

$$(1+U)\frac{V(H',H)}{(2\sinh 2H)^{n/2}} \text{ 与 } (1+U)\frac{V(H^*,H'^*)}{(2\sinh 2H'^*)^{n/2}}$$

之特征值是相等的。从此，可得譜(spectrum)关系式

$$\lambda_+(H^*,H'^*)=(\sinh 2H\cdot\sinh 2H')^{-n/2}\lambda_+(H',H). \quad (8.4)$$

特別，应用于最大特征值时，则因 $Z=\lambda^m_{\max}$ 而有

$$\frac{Z(H^*,H'^*)}{(\sinh 2H'^*)^{N/2}}=\frac{Z(H',H)}{(\sinh 2H)^{N/2}}. \quad (8.5)$$

这式当 $H\neq H'$ 时就是表里变换式。

轉移点滿足

$$H'=H^*,$$

因而是滿足

$$\sinh 2H'=\sinh 2H^*=1/\sinh 2H \quad (8.6)$$

的点。特別当 $H=H'$ 时，可得出前章(3.6)所説的由表里变換引起的状态和关系。

§ 9 2^n 維的代数，自旋表現

作为 2^n 維的代数 Q^n 之生成元素，可以导入如次的 $2n$ 个量。这 $2n$ 个量在第二級量子化(quantisation)或旋子論也能出現。

$$\Gamma_1=s_1\equiv p_1,\qquad \Gamma_3=C_1s_2\equiv p_2,\ \cdots,$$
$$\Gamma_2=iC_1s_1\equiv q_1,\ \ \Gamma_4=C_1(iC_2s_2)\equiv q_2,\ \cdots.$$

一般有

$$\begin{aligned}&\Gamma_{2r-1}=s_rC_{r-1}C_{r-2}\cdots C_2C_1\equiv p_r,\\&\Gamma_{2r}=C_1C_2\cdots C_{r-1}(iC_rs_r)\equiv q_r.\end{aligned}\qquad (r=1,\ 2,\ \cdots,\ n)\qquad (9.1)$$

从 C_i, s_i 間的交换关系容易推出上述那些量之間的交换关系，例如

$$\Gamma_r^2=1,\ \ \Gamma_r\Gamma_s=-\Gamma_s\Gamma_r. \tag{9.2}$$

这就是說，各量的平方是单位元素，不同量相乘是逆可换的(反称的)。Γ_k 所有可能的乘积中有 4^n 个綫性无关的量，那就是

$$1;\ \Gamma_1,\Gamma_2,\cdots,\Gamma_{2n};\ \Gamma_1\Gamma_2,\Gamma_2\Gamma_3,\cdots,\ \cdots;\ \Gamma_1\Gamma_2\cdots\Gamma_{2n};\tag{9.3}$$

用它們来架成 Q^n 是足够的了，实际上，只要能說明 C_k, s_k 可用这些量表示出来就行了。这从

$$C_k=ip_kq_k,\ \ s_k=p_k(ip_{k-1}q_{k-1})(ip_{k-2}q_{k-2})\cdots(ip_1q_1)$$

就可以立刻看出。

把 $\Gamma_1,\ \Gamma_2,\ \cdots,\ \Gamma_{2n}$ 看成向量的基底，由一次正交变换，换成新的基底 $\Gamma_1^*,\ \Gamma_2^*,\ \cdots,\ \Gamma_{2n}^*$，那么，有

$$\Gamma_k^*=\sum_{l=1}^{2n}\Gamma_lO_{lk}\quad (k=1,\ 2,\ \cdots,\ 2n). \tag{9.4}$$

新基底的交换关系是怎样的呢？首先計算如次的量：

$$\Gamma_k^{*2}=\sum_l O_{lk}^2+\sum_{l,m}O_{lk}O_{mk}(\Gamma_l\Gamma_m+\Gamma_m\Gamma_l)=1.$$

第一项由于 $\{O_{lk}\}$ 是正交矩陣而是1，第二项由于 Γ_k 之逆可换性而消去。同样由計算得

$$\begin{aligned}\Gamma_k^*\Gamma_j^*+\Gamma_j^*\Gamma_k^*&=\sum_{l,m}\sum_l(\Gamma_l\Gamma_m+\Gamma_m\Gamma_l)O_{lk}O_{mj}\\&=\sum_{l,m}2\,\delta_{l,m}O_{lk}O_{mj}\\&=\sum_l O_{lk}O_{lj}=0.\end{aligned}$$

这就是說，正交变换 O 使 $\Gamma_k \to \Gamma_k^*$，其間的代数关系不因之而改变。因此，把 $\Gamma_1^*, \Gamma_2^*, \cdots, \Gamma_{2n}^*$ 看成 2^n 維代数 Q^n 的生成元素(generating elements) 也无不可。

从另一观点来討論，对应

$$O: \Gamma_k \to \Gamma_k^*$$

給定了代数 Q^n 的自同构对应。由于完全矩陣代数的自同构仅限于内部自同构的原故，对应于 O 可找出一个元素 $S(O)$，使

$$\Gamma_k^* = S(O) \cdot \Gamma_k \cdot S(O)^{-1}$$

成立。$S(O)$ 称为正交变换 O 的自旋表現。例如对于

$$O: \begin{array}{l} \Gamma_k^* = \Gamma_k \cos\theta - \Gamma_l \sin\theta, \\ \Gamma_l^* = \Gamma_k \sin\theta + \Gamma_l \cos\theta, \end{array}$$

存在着

$$S(O) = \exp\left(\frac{\theta}{2} \Gamma_k \Gamma_l\right),$$

而有

$$\begin{aligned} S(O)\Gamma_k S(O)^{-1} &= \exp\left(\frac{\theta}{2} \Gamma_k \Gamma_l\right) \cdot \Gamma_k \cdot \exp\left(-\frac{\theta}{2} \Gamma_k \Gamma_l\right) \\ &= \Gamma_k \cos\theta - \Gamma_l \sin\theta = \Gamma_k^*. \end{aligned}$$

这里要用到展开式 $\exp(\alpha \Gamma_k \Gamma_l) = \cos\alpha + \Gamma_k \Gamma_l \sin\alpha$，而后者的成立是因为 $(\Gamma_k \Gamma_l)^2 = -1$，从此看出 $\Gamma_k \Gamma_l$ 具有和虚数单位 i 同样性质的原故。在討論过程中，不必把 Q^n 的单位元素特别提出来。和上面同样有

$$S(O)\Gamma_l S(O)^{-1} = \Gamma_k \sin\theta + \Gamma_l \cos\theta = \Gamma_l^*;$$

对于 Γ_k, Γ_l 以外的 Γ_i，当然也有

$$S(O)\Gamma_i S(O)^{-1} = \Gamma_i.$$

$S(O)$ 内含有旋轉角 θ 的半角 $\theta/2$，这是自旋表現之特征，构成所謂的 2 价表現。θ 改变 2π，旋轉并不改变，对于 $S(O)$ 添上 -1。这就是說 $\pm S(O)$ 构成 O 的自旋表現。反之，对应于 $S(O)$ 只有一

个旋轉变换 O。

在 Dirac 的电子波动方程内，Hamilton 函数出現了四个逆交换的量 Γ_1，Γ_2，Γ_3 及 Γ_4。这四个量組成 16 元数。它和 $2^n=4$ 維的完全矩陣代数是同构的。对应于 $2n=4$ 維空間的 Lorentz 变换 O 引出了 $2^n=4$ 維的自旋空間内的变换

$$\Psi \to S(O)\Psi.$$

$S(O)$ 是 O 之自旋表現，Ψ 是具有四个支量的 Dirac 波动函数。

最后对重要元素 U 进行討論。

$$U=C_1C_2\cdots C_n=i^n(p_1q_1)(p_2q_2)\cdots(p_nq_n)=i^n\Gamma_1\Gamma_2\cdots\Gamma_{2n}$$

和 Γ_1，Γ_2，…，Γ_{2n} 是逆可换的，即

$$\Gamma_kU=-U\Gamma_k,$$

从而偶数个 Γ_k 之积是可换的。因此，和 U 有可换关系的子代数 $[Q^n]$ 是以偶数个 Γ_k 之积作为基底元素的。U 在正交变换 O 之下，以下面的方式变换着：

$$\begin{aligned}U^*=\Gamma_1^*\Gamma_2^*\cdots\Gamma_{2n}^*&=\sum\Gamma_{l_1}\Gamma_{l_2}\cdots\Gamma_{l_{2n}}O_{l_1,1}O_{l_2,2}\cdots O_{l_{2n},2n}\\&=\det O\cdot\Gamma_1\Gamma_2\cdots\Gamma_{2n}\\&=U\cdot(\det O);\end{aligned}$$

$\det O$ 等于 1 或 -1。

§10 由 p,q 所成的 V 之表現

我們对于特征值运算子 V 的对称性作更进一步的推究。

原子的号碼一个一个地順移时，V 是不变的。就 C_i，s_i 而論（規定 $C_{n+i}=C_i$，$s_{n+i}=s_i$），

$$T:\ \begin{matrix}C_1\to C_2,\ C_2\to C_3,\ \cdots,\ C_n\to C_1,\\ s_1\to s_2,\quad s_2\to s_3,\ \cdots,\quad s_n\to s_1,\end{matrix}$$

这时 V 是不变的。对于 §9 新导入的基底 p_r，q_r 起着怎样的影响呢？把 (9.1) 的規定加以扩充使下标超过 n，就得如下的規定：

$$p_{n+1}=p_1U, \cdots, p_{n+k}=p_kU, \cdots, p_{2n}=p_1, \\ q_{n+1}=Uq_1, \cdots, q_{n+k}=Uq_k, \cdots, q_{2n}=q_1; \tag{10.1}$$

以 $2n$ 作为周期才回到原来开始的元素。

再把 V 利用 p_k, q_k 写出来。容易知道

$$\left.\begin{aligned} C_k&=ip_kq_k, \\ s_ks_{k+1}&=-ip_{k+1}q_k. \end{aligned} \quad (k=1, 2, \cdots, n)\right\} \tag{10.2}$$

在这里 $s_n s_{n+1}=s_n s_1=-ip_{n+1}q_1$，我們还注意到不是生成元素的量 $p_{n+1}=p_1U$ 也在这里出現了，这就是使得我們的討論麻煩的一个原因。由于

$$\begin{aligned} B&=C_1+C_2+\cdots+C_n=i(p_1q_1+p_2q_2+\cdots+p_nq_n), \\ A&=s_1s_2+s_2s_3+\cdots+s_ns_1 \\ &=-i(p_2q_1+p_3q_2+\cdots+p_{n+1}q_n), \end{aligned} \tag{10.3}$$

V 可用 p_r, q_r 表示出来。这对于以 $2n$ 为周期、号碼一个一个地順移的变换

$$R: p_k\to p_{k+1}, \quad q_k\to q_{k+1} \quad (k=1, \cdots, 2n) \tag{10.4}$$

是不变的。更一般地，对于变换 R 試作如下的不变式：

$$A_m=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{2n}p_{k+m}q_k=\sum_{k=1}^{n}p_{k+m}q_k(m=1, 2, \cdots, 2n), \tag{10.5}$$

那么，B 与 A 是 A_m 之特例：

$$B=iA_0, \quad A=-iA_1.$$

这时，V 可以写成如次的形式：

$$V=(2\sinh 2H)^{n/2}\exp(-iH'A_1)\exp(iH^*A_0) \tag{10.6}$$

§11 各种代数量

由(10.5)規定的 A_m 具有周期 $2n$：

$$A_{m+2n}=A_m,$$

因此，以 $2n$ 作为周期，进行 Fourier 展开，有

$$A_m=\sum_{r=1}^{2n}\left(X_r\cos\frac{rm}{n}\pi+Y_r\sin\frac{rm}{n}\pi\right). \qquad (11.1)$$

X_r 与 Y_r 是 Fourier 展开的运算子，

$$X_r=\frac{1}{2n}\sum_{m=1}^{2n}A_m\cos\frac{rm}{n}\pi,$$
$$Y_r=\frac{1}{2n}\sum_{m=1}^{2n}A_m\sin\frac{rm}{n}\pi; \qquad (11.2)$$

使用 p_r、q_r 改写上式，得

$$X_r=\frac{1}{4n}\sum_{k,l=1}^{2n}p_kq_l\cos\frac{r\pi}{n}(k-l),$$
$$Y_r=\frac{1}{4n}\sum_{k,l=1}^{2n}p_kq_l\sin\frac{r\pi}{n}(k-l). \qquad (11.3)$$

对于 p_k、q_l 的下标超过 n 的部分，利用关系 $p_{n+k}=p_kU$，$q_{n+k}=Uq_k$（注意 $p_kU=-Up_k$，$q_kU=-Uq_k$），就有

$$X_r=\frac{1}{2n}(1-(-1)^rU)\sum_{k,l=1}^{n}p_kq_l\cos\frac{r\pi}{n}(k-l),$$
$$Y_r=\frac{1}{2n}(1-(-1)^rU)\sum_{k,l=1}^{n}p_kq_l\sin\frac{r\pi}{n}(k-l). \qquad (11.4)$$

当 r 为奇数时，X_r 和 Y_r 属于具有幂等元素（子代数之单位元素）$(1+U)/2$ 的代数 Q_+^n；r 为偶数时，属于 Q_-^n。两者当然是正交的。上面的式子也可写成

$$X_{-r}=X_r=X_{2n-r},$$
$$Y_{-r}=-Y_r=Y_{2n-r}, \qquad (11.5)$$

所有的下标是以 $2n$ 作为模的。

为了简明地説明 X_r 与 Y_r，明确代数結构以及和整个代数相关的地位，轉移到以下新的母元（生成元素）。

这些元素是 p_k，q_k 的 Fourier 展开中所考虑的量，由正交变换可以求得。

$$\begin{aligned}\xi_r&=\sqrt{\frac{2}{n}}\sum_{k=1}^{n}p_k\cos\frac{r\pi}{n}k,\\ \xi'_r&=\sqrt{\frac{2}{n}}\sum_{k=1}^{n}p_k\sin\frac{r\pi}{n}k,\\ \eta_r&=\sqrt{\frac{2}{n}}\sum_{k=1}^{n}q_k\cos\frac{r\pi}{n}k,\\ \eta'_r&=\sqrt{\frac{2}{n}}\sum_{k=1}^{n}q_k\sin\frac{r\pi}{n}k.\end{aligned}\tag{11.6}$$

当 $r=0$, $r=n$ 时,則有

$$\begin{aligned}\xi_0&=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum p_k,\quad \eta_0=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum q_k,\\ \xi_n&=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum(-1)^k p_k,\quad \eta_n=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum(-1)^k q_k.\end{aligned}\tag{11.6'}$$

根据选定的是 r 之奇数列

$$1,\ 3,\ 5,\ \cdots,\ 2n-1$$

或偶数列

$$0,\ 2,\ 4,\ \cdots,\ 2n-2$$

而有二种正交变换 D^+ 或 D^-。

由 D^+ 轉移到新母元

$$\xi_1,\ \xi'_1,\ \eta_1,\ \eta'_1;\ \xi_3,\ \xi'_3,\ \eta_3,\ \eta'_3;\ \cdots;$$

由 D^- 轉移到新母元

$$\xi_0,\ \xi'_0;\ \xi_2,\ \xi'_2,\ \eta_2,\ \eta'_2;\ \cdots;$$

这些量关于下标以 $2n$ 作为模是相等的,那就是說,

$$\xi_{2n+r}=\xi_r,\ \xi'_{2n+r}=\xi'_r,\ \eta_{2n+r}=\eta_r\ \text{等等。}$$

其中,ξ 和 η 是偶函数,ξ' 和 η' 是奇函数,亦即

$$\xi_{2n-r}=\xi_{-r}=\xi_r,\ \xi'_{-r}=-\xi'_r,\ \eta_{-r}=\eta_r,\ \eta'_{-r}=-\eta'_r;$$

因此,无論是奇数列或偶数列,其中綫性无关的元素的个数都是 $2n$. 这 $2n$ 个元素中每一元素之自乘等于 1, 不同元素相乘是逆可换的,这类性质在正交变换下保持不变。因此,无論是奇数列或偶

数列的元素都可看做是构成代数 Q^n 的母元(生成元素)。ξ_n 与 η_n 由于 n 的奇偶性而属于奇数列或偶数列之中。所有的下标全限于从 0 起到 n 止。

其次,让我們考察重要的元素

$$U=i^n(p_1q_1)(p_2q_2)\cdots(p_nq_n)$$

在新基底之下到底取怎样的形式。容易証明

$$\sum_{r:\text{奇}}(\xi_r\eta_r+\xi'_r\eta'_r)=\sum_{k=1}^{n}p_kq_k.$$

式子左边的总和是由 1, 3, 5, … 直到奇数的 n, 如果 n 是偶数,则总和从 1, 3, 5, … 直到 $(n-1)$. 完全同样地,对于 0, 2, 4, … 直到 $n-1$ (或 n) 的偶数列,成立着

$$\sum_{r:\text{偶}}(\xi_r\eta_r+\xi'_r\eta'_r)=\sum_{k=1}^{n}p_kq_k.$$

从上面的关系得

$$\begin{aligned}
i^{-n}U&=\prod_{k=1}^{n}p_kq_k=\prod_{k=1}^{n}\exp\left(\frac{\pi}{2}p_kq_k\right)=\exp\frac{\pi}{2}\sum p_kq_k\\
&=\exp\frac{\pi}{2}\sum(\xi_r\eta_r+\xi'_r\eta'_r)\\
&=\begin{cases}\prod\limits_{r:\text{偶}}(\xi_r\eta_r)(\xi'_r\eta'_r),\\ \prod\limits_{r:\text{奇}}(\xi_r\eta_r)(\xi'_r\eta'_r).\end{cases}
\end{aligned}\tag{11.7}$$

U 是和所有的母元有牵涉的,一般,它对于正交变换是与变换的行列式有关的。正交变换的行列式是 ±1, 从上述証明看出变换 D^+ 和 D^- 的行列式等于 $+1$. U 和 ξ_r, η_r, ξ'_r, η'_r 中的每一个是逆可换的,和偶数个这样的母元是可换的。

§12 各种代数关系

前节(11.3)里得出的 X_r, Y_r 試利用新的母元(ξ_r, η_r, ξ'_r, η'_r)来表示。正弦、余弦用加法公式展开后,容易得出下式:

$$\left.\begin{aligned} X_r &= \frac{1-(-1)^r U}{4}(\xi_r\eta_r+\xi'_r\eta'_r), \\ Y_r &= \frac{1-(-1)^r U}{4}(\xi'_r\eta_r-\xi_r\eta'_r); \end{aligned}\right\} \tag{12.1}$$

从这里更规定

$$Z_r = X_rY_r = \frac{1-(-1)^r U}{4}(\xi'_r\xi_r-\eta'_r\eta_r),$$

$$E_r = -X_r^2 = -Y_r^2 = -Z_r^2 = \frac{1-(-1)^r U}{4}(1-\xi_r\eta_r\xi'_r\eta'_r),$$

那么，这样四个元素

$$K_r\colon\ \{E_r,\ X_r,\ Y_r,\ Z_r\}$$

构成 4 元数的基底，这就是說，满足下面的代数关系：

$$\begin{aligned} & X_r^2 = Y_r^2 = Z_r^2 = -E_r, \quad E_r^2 = E_r, \\ & X_rE_r = E_rX_r = X_r, \quad Y_rE_r = E_rY_r = Y_r, \\ & Z_rE_r = E_rZ_r = Z_r, \\ & X_rY_r = -Y_rX_r = Z_r, \quad Z_rX_r = -X_rZ_r = Y_r, \\ & Y_rZ_r = -Z_rY_r = X_r. \end{aligned} \tag{12.2}$$

这些关系之满足，从 $(\xi_r,\ \eta_r,\ \xi'_r,\ \eta'_r)$ 的代数关系就立刻可以推知。

值得注意的是前章出現过的 4 元数 1, s_i, C_i, is_iC_i 是所謂 Hermite 型的，自乘以后等于 1，特征值是实数(±1)；这里出現的可說是 4 元数之原型。当然这两个型是同构的。

特别当 $r=0$ 时，有 $Y_0\equiv 0$，

$$X_0 = \frac{1-U}{2}(\xi_0\eta_0), \quad E_0 = \frac{1-U}{2}, \quad E_0^2 = E_0, \tag{12.3}$$

$$X_0^2 = -\frac{1-U}{2} = -E_0, \quad X_0E_0 = E_0X_0 = X_0.$$

当 $r=n$ 时，有 $Y_n\equiv 0$，

$$X_n = \frac{1-(-1)^n U}{2}(\xi_n\eta_n), \quad E_n = \frac{1-(-1)^n U}{2}, \quad E_n^2 = E_n, \tag{12.4}$$

$$X_n^2 = -E_n, \quad X_nE_n = E_nX_n = X_n.$$

无論是前者或后者，它們都組成阶数2的可换代数，和复数是同构的。

以上說的是同标号的基底构成封閉的(closed)代数，今后对于不同标号的基底，試察其間的关系。首先，标号为奇数的基底和标号为偶数的基底是正交的，这就是說奇数的基底属于Q^n_+，偶数的基底属于Q^n_-。一般說来，标号不同的基底是可换的。如把$[AB-BA]$写做$[A, B]$，則

$$\begin{aligned}&[X_r, X_s]=[Y_r, Y_s]=[Z_r, Z_s]=0,\\&[X_r, Y_s]=[Y_r, Z_s]=[Z_r, X_s]=0,\end{aligned}\quad (r+s\neq 0)\qquad (12.5)$$

这些交换关系从$\xi_r, \xi'_r, \eta_r, \eta'_r$之二次式与$\xi_s, \xi'_s, \eta_s, \eta'_s$之二次式是可换的这桩事实立刻可以推知。这种在不同标号情况下的可换性可以解决我們的特征值問題。亦即如从(11.1)看出的那样，A_0与A_1可分解为可互换的运算子之和。对此以后还要提到。

現在試察各标号的4元数所成的全代数間的关系。标号r的代数(4元数或复数)記以$\boldsymbol{K}_r$。在$\boldsymbol{K}_r$里除U外只含有四个逆交换的元素：

$$\xi_r, \xi'_r, \eta_r, \eta'_r.$$

这四个元素产生阶数16的代数(Dirac代数，16元数(sedenion))，和U成可换的子代数，也就是說由上述四个元素的偶数个积所成的代数，其阶数为8，是半单純的，把它記作$\boldsymbol{F}_r$。

把$\boldsymbol{F}_r$分解为二个4元数$\boldsymbol{K}'_r$与$\boldsymbol{K}''_r$之直和。对应于$\boldsymbol{F}_r$之单位元素1的分解：

$$1=E'_r+E''_r,$$

$$E'_r=\frac{1}{2}(1-\xi_r\eta_r\xi'_r\eta'_r),\quad E''_r=\frac{1}{2}(1+\xi_r\eta_r\xi'_r\eta'_r),$$

$\boldsymbol{F}_r$之其他基底元素可分解成

$$X'_r=\frac{1}{2}(\xi_r\eta_r+\xi'_r\eta'_r),\quad X''_r=\frac{1}{2}(\xi_r\eta_r-\xi'_r\eta'_r),$$

$$Y'_r=\frac{1}{2}(\xi'_r\eta_r-\xi_r\eta'_r),\quad Y''_r=\frac{1}{2}(\xi'_r\eta_r+\xi_r\eta'_r),$$

$$Z'_r=\frac{1}{2}(\xi'_r\xi_r-\eta'_r\eta_r),\quad Z''_r=\frac{1}{2}(\xi'_r\xi_r+\eta'_r\eta_r).$$

这样就把 $\boldsymbol{F}_r$ 分解为二个理想子环，每一个子环和 4 元数 $\boldsymbol{K}$ 是同构的；而且 $\boldsymbol{F}_0$, $\boldsymbol{F}_n$ 是阶数 2 的可换代数。

$$\boldsymbol{F}_1,\ \boldsymbol{F}_3,\ \boldsymbol{F}_5,\ \cdots,\ \begin{cases}\boldsymbol{F}_n(n\text{ 是奇数时}),\\ \boldsymbol{F}_{n-1}(n\text{ 是偶数时}),\end{cases}$$

两系列同有单位元素 1，彼此間是可换的。如考虑这些个元素的直积代数

$$\boldsymbol{K}_{\text{奇数}}\equiv\boldsymbol{F}_1\times\boldsymbol{F}_3\times\boldsymbol{F}_5\times\cdots\times\begin{cases}\boldsymbol{F}_n,\\ \boldsymbol{F}_{n-1},\end{cases}$$

则

$$\boldsymbol{K}_r\in\boldsymbol{K}_{\text{奇数}}(1+U)/2\quad(r\text{:奇数}).$$

同样对于偶数列，作

$$\boldsymbol{K}_{\text{偶数}}\equiv\boldsymbol{F}_0\times\boldsymbol{F}_2\times\boldsymbol{F}_4\times\cdots\times\begin{cases}\boldsymbol{F}_{n-1},\\ \boldsymbol{F}_n\end{cases}$$

时，则有

$$\boldsymbol{K}_r\in\boldsymbol{K}_{\text{偶数}}(1-U)/2\quad(r\text{: 偶数}).$$

当然，

$$\boldsymbol{K}_{\text{奇数}}(1+U)/2\in\boldsymbol{Q}^n_+,$$
$$\boldsymbol{K}_{\text{偶数}}(1-U)/2\in\boldsymbol{Q}^n_-.$$

从(11.1)，可写

$$\begin{aligned}A_0&=X_0+X_1+X_2+\cdots+X_n+\cdots+X_{2n-1}\\&=X_0+2(X_1+X_2+\cdots+X_{n-1})+X_n,\end{aligned}\tag{12.6}$$

但这里应用到关系 $X_{2n-r}=X_{-r}=X_r$。此外，还可把 A_1 写成

$$\begin{aligned}A_1&=X_0+X_1^*+X_2^*+\cdots+X_n^*+\cdots+X_{2n-1}^*\\&=X_0+2(X_1^*+X_2^*+\cdots+X_{n-1}^*)-X_n.\end{aligned}\tag{12.7}$$

不过这里的 * 是由如下的关系式规定的：

$$\begin{cases} X_r^* = X_r \cos\omega_r + Y_r \sin\omega_r, \\ Y_r^* = X_r \sin\omega_r - Y_r \cos\omega_r \quad \left(\omega_r = \dfrac{r\pi}{n}\right), \\ Z_r^* = -Z_r. \end{cases} \tag{12.8}$$

从此就得到

$$X_{-r}^* = X_r^*,\ Y_{-r}^* = -Y_r^*,\ Z_{-r}^* = -Z_r^*,$$

$\{E_r, X_r^*, Y_r^*, Z_r^*\}$ 构成 4 元数的基底。如

$$\begin{aligned} &X_r^{*2} = Y_r^{*2} = Z_r^{*2} = -E_r,\ X_r^* Y_r^* = -Y_r^* X_r^* = Z_r^*, \\ &Y_r^* Z_r^* = -Z_r^* Y_r^* = X_r^*, \quad Z_r^* X_r^* = -X_r^* Z_r^* = Y_r^* \end{aligned} \tag{12.9}$$

这些关系是和沒有 * 的量完全相同的。

取关系式(12.8)之逆，可得到完全同样的式子

$$\begin{aligned} &X_r = X_r^* \cos\frac{r\pi}{n} + Y_r^* \sin\frac{r\pi}{n}, \\ &Y_r = X_r^* \sin\frac{r\pi}{n} - Y_r^* \cos\frac{r\pi}{n}, \\ &Z_r = -Z_r^*. \end{aligned} \tag{12.8'}$$

由于 X_r^*, Y_r^* 对于 A_1 的关系和 X_r, Y_r 对于 A_0 的关系完全一样，所以 $X, Y \to X^*, Y^*$ 意味着向里格子轉移的变換。对于表里变換，問題的对称性就在子代数 K_r 里也表現出来了。

§ 13 特征值問題之解法

把(12.6)，(12.7)代入(10.6)，得到

$$\begin{aligned} V = (2\sinh 2H)^{n/2} &\exp\{-iH'(X_0 + 2X_1^* + 2X_2^* + \cdots \\ &+ 2X_{n-1}^* - X_n)\} \times \exp\{iH^*(X_0 + 2X_1 + 2X_2 + \cdots \\ &+ 2X_{n-1} + X_n)\}. \end{aligned} \tag{13.1}$$

一般，如 a, b 是可換的元素，利用关系

$$e^{a+b} = e^a \cdot e^b = e^b \cdot e^a,$$

則 V 可使有关代数 $K_0, K_1, \cdots, K_{n-1}, K_n$ 的量联系在一起。那

就是說，如以

$$V_0=\exp\{i(H^*-H')X_0\},$$
$$V_r=\exp\{-2iH'X_r^*\}\exp\{2iH^*X_r\}, \tag{13.2}$$
$$V_n=\exp\{i(H^*+H')X_n\},$$

則有

$$V=(2\sinh 2H)^{n/2}V_0V_1V_2\cdots V_{n-1}V_n. \tag{13.3}$$

这时，V 是属于 $\boldsymbol{Q}_+^n$ 的 V_+ 与属于 $\boldsymbol{Q}^n$ 的 V_- 之直和。这里

$$\begin{aligned}V_+&=\frac{1+U}{2}V\\&=(2\sinh 2H)^{n/2}\cdot\frac{(1+U)}{2}V_1V_3V_5\cdots\begin{cases}V_n & (n:奇),\\V_{n-1} & (n:偶),\end{cases}\\V_-&=\frac{1-U}{2}V\\&=(2\sinh 2H)^{n/2}\cdot\frac{(1-U)}{2}V_0V_2V_4\cdots\begin{cases}V_{n-1} & (n:奇),\\V_n & (n:偶).\end{cases}\end{aligned} \tag{13.4}$$

V_+ 或 V_- 分开来解就可以了。无論解那一方面，由于 V_r 互为可换，所以对各因子求出特征值，然后乘起来就成了。但由于 $\boldsymbol{K}_1$，$\boldsymbol{K}_3$，…等并不是完全无关的，因此，不是任何組合方式都行。不能不只选擇那种満足条件 $U=1$ 或 -1 的組合。对于它以后还要提到。

这里对各个 V_r 討論特征值問題的解法。首先从 $r=0$ 开始。

$$V_0=\exp\{-i(H'-H^*)X_0\},$$

$$X_0=\frac{1-U}{2}(\xi_0\eta_0),\quad (iX_0)^2=\frac{1-U}{2}.$$

在 $U=-1$ 的子空間内取 $iX_0=\pm 1$ 的特征值，

在 $U=1$ 的子空間内取 $iX_0=0$ 的特征值。

因而，V_0 之特征值是

$$\exp(H'-H^*),\quad \exp\{-(H'-H^*)\},\quad 1.$$

对于

$$V_n=\exp\{i(H'+H^*)X_n\},$$

同样地进行,得特征值

$$\exp(H'+H^*),\quad \exp\{-(H'+H^*)\},\quad 1.$$

現在試考虑一般 r 的情况。

$$V_r=\exp(-2iH'X_r^*)\exp(2iH^*X_r),$$

或者利用相似变換,写成对称形式:

$$\begin{aligned}V_r'&=\exp(iH'X_r^*)V_r\exp(-iH'X_r^*)\\&=\exp(-iH'X_r^*)\exp(2iH^*X_r)\exp(-iH'X_r^*)\end{aligned}\tag{13.5}$$

使結果整齐化。一般,$(iX)^2=E$ 时,利用展开式

$$\begin{aligned}\exp(i\beta X)&=1+\beta(iX)+\frac{\beta^2}{2!}E+\frac{\beta^3}{3!}(iX)+\frac{\beta^4}{4!}E+\cdots\\&=1-E+E\cosh\beta+iX\sinh\beta,\end{aligned}$$

則

$$\begin{aligned}V_r'=&(1-E_r+E_r\cosh H'-iX_r^*\sinh H')\\&\times(1-E_r+E_r\cosh 2H^*+iX_r\sin 2H^*)\\&\times(1-E_r+E_r\cosh H'-iX_r^*\sinh H').\end{aligned}$$

作出这个乘积,經整理后得

$$\begin{aligned}V_r'=&(1-E_r)+E_r(\cosh 2H'\cosh 2H^*-\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega_r)\\&-iX_r^*(\cosh 2H^*\sinh 2H'-\sinh 2H^*\cosh 2H'\cos\omega_r)\\&+iY_r^*(\sinh 2H^*\sin\omega_r).\end{aligned}\tag{13.6}$$

在这里我們再利用双曲三角形角与边的关系:

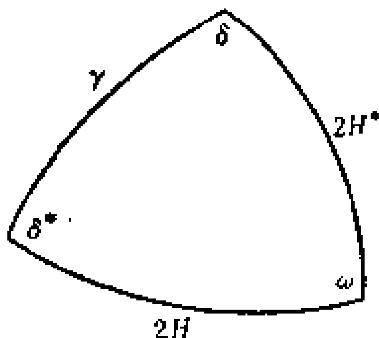


图 13.1 双曲三角形

$$\begin{aligned}\cosh\gamma=&\cosh 2H'\cosh 2H^*\\&-\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega,\\\sinh\gamma\cos\delta^*=&\sinh 2H'\cosh 2H^*\\&-\cosh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega,\\\frac{\sin\omega}{\sinh\gamma}=&\frac{\sin\delta^*}{\sinh 2H^*}=\frac{\sin\delta'}{\sinh 2H'}.\end{aligned}\tag{13.7}$$

这些式子是把球面三角形各边以純虛数表示，从球面三角的公式而得到的。最后可把 V'_r 写成

$$V'_r=(1-E_r)+E_r\cosh\gamma_r+\sinh\gamma_r[-iX^*_r\cos\delta^*_r+iY_r\sin\delta^*_r]$$
$$=\exp\{i\gamma_r(-X^*_r\cos\delta^*_r+Y^*_r\sin\delta^*_r)\}. \tag{13.8}$$

就几何意义来讲，这意味着：繞 X^* 軸旋轉一个虛角 $-2iH'$，其次繞 X 軸旋轉虛角 $4iH^*$，最后再繞 X^* 軸旋轉一个虛角 $-2iH'$，經三回旋轉合成的結果，等于圍繞方向 $(-X^*_r\cos\delta^*_r+Y^*_r\sin\delta^*_r)$ 旋轉虛角 $2i\gamma_r$ 的結果。

最初由 Hamilton 引进的 4 元数，就是为了要象上述那样把剛体的旋轉解析地表达出来。

式 (13.8) 內的旋轉軸虽說在 X-Y 平面上，但为了使这个軸向在这个平面自由地轉換，利用繞 Z 軸（或 Z^* 軸）之旋轉加以变换就成。实际上，利用

$$\exp(\alpha Z)\cdot(X\cos\beta+Y\sin\beta)\exp(-\alpha Z)$$
$$=X\cos\beta\cdot\exp(-2\alpha Z)+Y\sin\beta\exp(-2\alpha Z)$$
$$=X\cos(\beta+2\alpha)+Y\sin(\beta+2\alpha), \tag{13.9}$$

得 $\exp(\alpha Z)\exp\{-i\gamma(X^*\cos\delta^*-Y^*\sin\delta^*)\}\exp(-\alpha Z)$

$$=\exp\{-i\gamma(X^*\cos(-\delta^*+2\alpha)+Y^*\sin(2\alpha-\delta^*))\}.$$

这里如令 $2\alpha-\delta^*=\pi$，$\alpha=(\pi+\delta^*)/2$，則有

$$\exp\left\{\frac{\pi+\delta^*_r}{2}Z^*_r\right\}\cdot V'_r\cdot\exp\left\{-\frac{\pi+\delta^*_r}{2}Z^*_r\right\}=\exp\{i\gamma_rX^*_r\}. \tag{13.10}$$

这式是用 X^*_r 表出的，如用 X_r 来表示，則考虑到

$$\exp\left(-\frac{\omega_r}{2}Z_r\right)\cdot(X\cos\omega_r+X\sin\omega_r)\cdot\exp\left(\frac{\omega_r}{2}Z_r\right)=X_r$$

并以
$$T_r=\exp\left(-\frac{\omega_r+\delta^*_r+\pi}{2}\right);$$

就到达最后的結果

$$T_r V_r' T_r'^{-1} = \exp(i\gamma_r X_r). \tag{13.11}$$

由于

$$(iX_r)^2 = E_r, \quad (iX_r)^3 = (iX_r);$$

因而 $iX_r(iX_r+1)(iX_r-1)=0$ 是 iX_r 的特征方程，特征值是 0, -1 与 1. 于是 V_r 之特征值是 1, $\exp\gamma_r$, $\exp(-\gamma_r)$.

以上解决了个别的特征值問題，以下再就全体加以考虑。

經适当变换后，由 V_+ 可得到 $\widetilde{V}_+$:

$$\widetilde{V}_+ = \begin{cases} (2\sinh 2H)^{n/2} \dfrac{1+U}{2} \exp\{i\gamma_1 X_1 + i\gamma_3 X_3 + \cdots \\ \qquad + i(H'+H^*)X_n\}, \quad (n: 奇) \\ (2\sinh 2H)^{n/2} \dfrac{1+U}{2} \exp\{i\gamma_1 X_1 + i\gamma_3 X_3 + \cdots \\ \qquad + i\gamma_{n-1} X_{n-1}\}. \quad (n: 偶) \end{cases} \tag{13.12}$$

这里把 X_i, X_n 考虑为

$$X_i = \frac{1+U}{2} \cdot \frac{\xi_i\eta_i + \xi_i'\eta_i'}{2}, \quad X_n = \frac{1+U}{2}(\xi_n\eta_n).$$

由于 $(i\xi_1\eta_1)^2=1$, $(i\xi_1'\eta_1')^2=1$, 所以它們取 ±1 的特征值；但把它們取作完全无关是办不到的，我們不能不这样地选取

$$U = \begin{cases} (i\xi_1\eta_1)(i\xi_1'\eta_1')\cdots(i\xi_n\eta_n) & (n: 奇) \\ (i\xi_1\eta_1)(i\xi_1'\eta_1')\cdots(i\xi_{n-1}'\eta_{n-1}') & (n: 偶) \end{cases}$$
$$= 1. \tag{13.13}$$

因而，最大特征值按照

$$(i\xi_1\eta_1) = (i\xi_1'\eta_1') = \cdots = (i\xi_n\eta_n) = 1 \qquad (n: 奇)$$
$$(i\xi_1\eta_1) = (i\xi_1'\eta_1') = \cdots = (i\xi_{n-1}'\eta_{n-1}') = 1 \qquad (n: 偶)$$

选定时，如最大特征值記作 λ_+, 則得

$$\log\lambda_+ - \frac{n}{2}\log(2\sinh 2H) = \begin{cases} \gamma_1+\gamma_3+\cdots+(H'+H^*) & (n: 奇), \\ \gamma_1+\gamma_3+\cdots+\gamma_{n-1} & (n: 偶). \end{cases} \tag{13.14}$$

为了写得簡洁起見，以

$$\gamma_{-r}=\gamma_r,\quad \gamma_n=2(H'+H^*),$$

总和从 1 加到 $2n-1$，則得到

$$\log\lambda_+-\frac{1}{2}n\log(2\sinh 2H)=\frac{1}{2}\sum_{r=1}^{n}\gamma_{2r-1}$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{r=1}^{n}\cosh^{-1}(\cosh 2H'\cosh 2H^*$$

$$-\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos(2r-1)\pi/2n). \qquad (13.15)$$

比这个較小的特征值可取偶数个的 $(i\xi_r\eta_r)$ 之值等于 -1 而得出。这就是說，求次大的特征值，考慮

$$0<\gamma_1<\gamma_3<\gamma_5<\cdots<2(H'+H^*)$$

就可以，因而把最小的 γ_1 之符号改变一下就可得出。换言之，以

$$(i\xi_1\eta_1)=-1,\quad (i\xi_1'\eta_1')=-1,$$

得到

$$-\gamma_1+\gamma_3+\cdots+\begin{Bmatrix}H+H^*\\ \gamma_{n-1}\end{Bmatrix}=\log\lambda_+-2\gamma_1. \qquad (13.16)$$

这意味着次大的特征值和最大特征值間存在着有限差距。其次，在 $U=1$ 的限制下，n 个因子的特征值可取作 ±1，全部共得 2^{n-1} 个特征值，从这些个特征值可作出 V_+ 的特征值。

其次，让我們轉到 V_- 的特征值問題。对它施用同样适当的变换，則和以前一样，可得出

$$\tilde{V}_-=\begin{cases}(2\sinh 2H)^{n/2}\dfrac{1+U}{2}\exp\{-i(H'-H^*)X_0\\ \qquad +i\gamma_2X_2+\cdots+i(H'+H^*)X_n\} \quad (n:\text{偶}),\\ (2\sinh 2H)^{n/2}\dfrac{1-U}{2}\exp\{-i(H'-H^*)X_0\\ \qquad +i\gamma_2X_2+\cdots+i\gamma_{n-1}X_{n-1}\} \quad (n:\text{奇}).\end{cases} \qquad (13.17)$$

不过这一次不能不在条件

$$U=\begin{cases}(i\xi_0\eta_0)(i\xi_2\eta_2)(i\xi_2'\eta_2')\cdots(i\xi_n\eta_n) & (n:\text{偶})\\(i\xi_0\eta_0)(i\xi_2\eta_2)(i\xi_2'\eta_2')\cdots(i\xi_{n-1}'\eta_{n-1}') & (n:\text{奇})\end{cases}$$
$$=-1 \tag{13.18}$$

之下确定

$$X_0=\frac{1-U}{2}(\xi_0\eta_0),\quad X_i=\frac{1-U}{2}\cdot\frac{\xi_i\eta_i+\xi_i'\eta_i'}{2},$$
$$X_n=\frac{1-U}{2}\xi_n\eta_n$$

的特征值。U 的各因子中，奇数个取特征值 -1，亦即取

$(i\xi_0\eta_0)=-1$，其他全部取作 1。

如以 X_i 来表示，则有

$$(iX_0)=-1,\quad iX_2=iX_4=\cdots=\begin{Bmatrix}iX_n\\iX_{n-1}\end{Bmatrix}=1,$$

它們的組合就构成 V_- 之最大特征值。如記为 λ_-，则有

$$\log\lambda_--\frac{n}{2}\log(2\sinh 2H)$$
$$=\begin{cases}(H'-H^*)+\gamma_2+\gamma_4+\cdots+(H'+H^*) & (n:\text{偶}),\\(H'-H^*)+\gamma_2+\gamma_4+\cdots+\gamma_{n-1} & (n:\text{奇}).\end{cases} \tag{13.19}$$

这和(13.14)的 λ_+ 比較，明显地看出有

$$\lambda_+>\lambda_-.$$

以

$$\gamma_0=\cosh^{-1}(\cosh 2H'\cosh 2H^*-\sinh 2H'\sinh 2H^*)$$
$$=2|H'-H^*|$$

来规定 $\gamma_0>0$ 时，则得

$$\log\lambda_--\frac{n}{2}\log(2\sinh 2H)=(H'-H^*)+\frac{1}{2}\sum_{r=1}^{n-1}\gamma_{2r}$$
$$=\frac{1}{2}\left(\gamma_0\operatorname{sgn}(H'-H^*)+\sum_{r=1}^{n-1}\gamma_{2r}\right). \tag{13.20}$$

式右側的第一項在 $H'=H^*$ 这一点的两边要变符号，这現象是这

个情况的特征。$H'=H^*$ 是确定轉移温度的式子。

其次，当 $n\to\infty$ 时，比較 λ_+ 与 λ_-。

$H'\geqslant H^*$ 时，二个和式

$$\gamma_1+\gamma_3+\cdots+\gamma_{2n-1}=\gamma(\pi/n)+\gamma(3\pi/n)+\cdots,$$

$$\gamma_0+\gamma_2+\cdots+\gamma_{2n-2}=\gamma(0)+\gamma(2\pi/n)+\cdots$$

可看成是作为根据梯形法則近似于积分

$$\frac{n}{2\pi}\int_0^{2\pi}\gamma(\omega)d\omega$$

的两种方法。这两种方法当区間的数目增加时可以很快地逼近周期的解析函数。对于

$$\lim_{n\to\infty}\lambda_-/\lambda_+=1 \quad (H'\geqslant H^*), \tag{13.21}$$

亦即在轉移点以下的时候，特征值二重简并，所謂长距离秩序是存在的。

对于上述二种和，当 $H'<H^*$，亦即在轉移点以上时，后一和可改写成

$$-\gamma_0+\gamma_2+\cdots+\gamma_{2n-2}=-2\gamma_0+(\gamma_0+\gamma_2+\cdots+\gamma_{2n-2}),$$

和原来的比較，只有 $-2\gamma_0=2(H'-H^*)<0$ 的差别。因此两者之比是

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\lambda_-}{\lambda_+}=\exp 2(H'-H^*)<1. \tag{13.22}$$

在轉移点以上，λ_+ 是孤立的最大特征值，和次大的特征值間有有限的間隔，因此，在晶体內不存在长距离秩序。

其他的特征値在 $n\to\infty$ 时构成連續带，其情况表示如下：

$$\lambda_+=\lambda_->(\text{連續带}) \quad (\text{轉移点以下}),$$

$$\lambda_+=\lambda_-=\lim(\text{連續带}) \quad (\text{轉移点}),$$

$$\lambda_+>\lambda_-=\lim(\text{連續带}) \quad (\text{轉移点以上}).$$

§14 状态和及热力学的各种量

从最大特征值 λ_+ 取 $n\to\infty$ 时的极限，一个左右的状态和可利用

$$\lambda=\lim_{n\to\infty}(\lambda_+)^{1/n} \tag{14.1}$$

来规定。如把(13.15)的和用积分写出，则有

$$\log\lambda=\frac{1}{2}\log(2\sin 2H)+\frac{1}{2\pi}\int_0^\pi\gamma(\omega)d\omega, \tag{14.2}$$

但这里

$$\cosh\gamma(\omega)=\cosh 2H'\cosh 2H^*-\sinh 2H'\sinh 2H^*\cos\omega, \tag{14.3}$$

为了把(14.2)写成关于 H, H' 的对称形式，利用恒等式

$$\int_0^{2\pi}\log(2\cosh x-2\cos\omega)d\omega=2\pi x, \tag{14.4}$$

则(14.2)可用二重积分

$$\log(\lambda/2)=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi\log(\cosh 2H\cosh 2H'$$
$$-\sinh 2H\cos\omega-\sinh 2H'\cos\omega')d\omega\,d\omega' \tag{14.5}$$

来表示。这是式(2.22)的自然扩充形式。对于(14.5)，如以

$$2\kappa=\tanh 2H/\cosh 2H'=\sin g\cos g',$$
$$2\kappa'=\tanh 2H'/\cosh 2H=\cos g\sin g',$$

把对数展开为关于 κ、κ' 之幂级数，然后逐项积分，则有

$$\log\lambda-\frac{1}{2}\log(4\cosh 2H\cosh 2H')$$
$$=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi\int_0^\pi\log(1-2\kappa\cos\omega-2\kappa'\cos\omega')d\omega\,d\omega'$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{r+s>0}(2r+2s-1)!(r!)^{-2}(s!)^{-2}\kappa^{2r}\kappa'^{2s}, \tag{14.6}$$

特别当 $H=H'$; $\kappa=\kappa'$ 时得

$$\log\lambda-\log(2\cosh 2H)=\frac{1}{2}\pi^{-2}\iint\log(1-4\kappa\cos\omega_1\cos\omega_2)d\omega_1 d\omega_2$$

$$=-\sum_{n=1}^{\infty}\left(\binom{2n}{n}^2\Big/4n\right)\kappa^{2n}. \tag{14.7}$$

这些展开式对于 H, H' 之所有数值是收敛的，因为

$$|2\kappa\cos\omega+2\kappa'\cos\omega'|\leqslant 2\kappa+2\kappa'=\sin(g+g')\leqslant 1.$$

級数收敛的极限給出轉移点，就在这点上級数也是收敛的。上述二重积分再利用(14.4)换成一重积分，如使用記号

$$k_1=4\kappa_1=2\sinh 2H/\cosh^2 2H,$$

$$k_1''=\pm(1-k_1^2)^{1/2}=2\tanh^2 2H-1,$$

$$|k_1''|=k_1',$$

則可得

$$\log(\lambda/2\cosh 2H)=\frac{1}{2\pi}\int_0^{\pi}\log\left\{\frac{1}{2}(1+(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{1/2})\right\}d\varphi.$$

在积分号内进行微分，一原子左右的内部能量 U 是

$$U=-J\frac{d\log\lambda}{dH}=-J\coth 2H\left(1+\frac{2}{\pi}k_1''K_1\right). \tag{14.8}$$

因而，热容量 C 由次式决定：

$$C=kH^2\frac{d^2\log\lambda}{dH^2}=k(H\coth 2H)^2(2/\pi)$$

$$\times\left\{2K_1-2E_1-(1-k_1'')\left(\frac{1}{2}\pi+k_1''K_1\right)\right\}. \tag{14.9}$$

在这些式子内，K_1 和 E_1 是完全椭圓积分：

$$K_1=K(k_1)=\int_0^{\pi/2}(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{-1/2}d\varphi,$$

$$E_1=E(k_1)=\int_0^{\pi/2}(1-k_1^2\sin^2\varphi)^{1/2}d\varphi.$$

奇异性发生在 $H=H^*=\frac{1}{2}\log\cot\pi/8$ 的时候，在这一点，$k_1=1$；$K_1=\infty$；$E_1=1$.

这时比热量是无穷大，但能量由于 $k_1''=0$ 而是連續的。要看出这个奇异性，在这奇异点 H_c 的附近展开即可。

$$K_1 \sim \log(4/k_1') \sim \log(2^{1/2}/|H-H_c|),$$
$$C/k \sim (2/\pi)(\log\cot\pi/8)^2\left(K_1-1-\frac{1}{4}\pi\right). \qquad (14.10)$$

比热按照对数的形态增加到无穷大，这是这个理論中最有意义的結論。

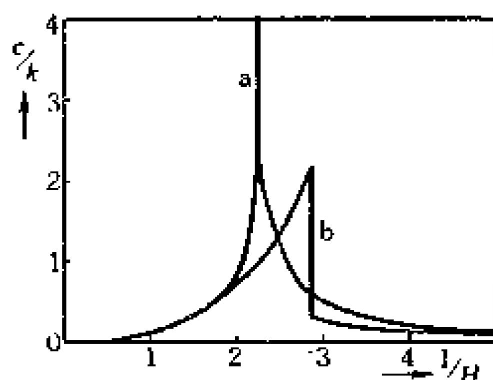


图 14.1 比热曲綫
(a) 严密理論(Onsager)，
(b) 近似理論(Bethe)

到此为止我們使用 Ising 模型作出了各种近似理論，比热在轉移点处形成有限的飞跃，但这样就发生了使給定的轉移点失去应有高度的不利情况。近似理論与严密理論的比較如图 14.1 所示。在 $H \neq H'$ 时，轉移温度在图上不过稍平坦一点，在本质上并无何种差别。对于其他型式的二維格子，轉移点的性质并不改变。

参考文献

关于矩陣方法方面，有

[1] R. Kubo (久保亮五)：物性論研究，**1** (1943).

[2] H. A. Kramers, G. H. Wannier: Phys. Rev., **60** (1941), 252.

[3] E. Montroll: J. Chem. Phys., **9** (1941), 706.

[4] E. N. Lasettre, J. P. Howe: J. Chem. Phys., **9** (1941), 747.

关于平面格子的各种变换方面，有

[5] G. H. Wannier: Rev. Mod. Phys., **17** (1945), 50.

[6] I. Syozi (庄司一郎)：Prog. Theo. Phys., **6** (1951), 306.

[7] I. Syozi (庄司一郎)：Scie. Pap. of Osaka Univ., **1** (1953), 1.

[8] I. Syozi (庄司一郎)：神戸商船大学紀要，理工学篇，**第2号** (1955).

[9] G. F. Newell, E. W. Montroll: Rev. Mod. Phys., **25** (1953), 353.

关于四角格子的精密解，首先有

[10] L. Onsager: Phys. Rev., **65** (1944), 117.

对此理論进行簡明化的，有

[11] Y. Nambu: Prog. Theo. Phys., **5** (1950), 1.

[12] L. Onsager, B. Kaufman: Phys. Soc. Cambridge, Conference Report (1947), 137.

[13] B. Kaufman: Phys. Rev., **76** (1949), 1232.

[14] 伏見康治編，量子統計力学(共立，1948), 336.

关于扩充到蜂巢格子与三角格子方面的，有

[15] K. Husimi, I. Syozi (伏見康治，庄司一郎)：Prog. Theo. Phys., **5** (1950), 117.

[16] I. Syozi (庄司一郎)：Prog. Theo. Phys., **5** (1950), 341.

[17] R. M. F. Houtappel: Physica, **16** (1950), 425.

[18] H. N. V. Temperley: Proc. Roy. Soc. (London), **203A** (1950), 202.

[19] G. H. Wannier: Phys. Rev., **79** (1950), 357.

[20] G. F. Newell: Phys. Rev., **79** (1950), 876.

关于蜂眼格子及其他方向扩充的，有

[21] T. Utiyama: Prog. Theo. Phys., **6** (1951), 306.

[22] K. Kano, S. Naya: Prog. Theo. Phys., **10** (1953), 158.

[23] 加納，納：物性論研究，**40** (1951).

利用組合論解决四角格子問題的，有

[24] M. Kac, J. C. Ward: Phys. Rev., **88** (1952), 1332.

关于自发磁性方面，有

[25] C. N. Yang (楊振宁): Phys. Rev., **85** (1952), 809.

[26] R. B. Potts: Phys. Rev., **88** (1952), 392.

[27] S. Naya: Prog. Theo. Phys., **11** (1954), 53.

有关綜合报告的有[7]与[9]，应用于格子气体的，有

[28] C.N. Yang, T. D. Lee (楊振宁，李政道): Phys. Rev., **87** (1952), 404.

[29] T. D. Lee, C. N. Yang (李政道，楊振宁): Phys. Rev., **87** (1952), 410.

校 后 記

張 宗 燧

这本书的主要内容是将代数学应用到晶体的秩序化(ordering)現象上去的一些理論。如众所周知，自1934年起卽有了关于秩序化的理論(Bragg-Williams, 1934; Bethe, 1935)，与实驗結果定性上是符合的。但这些理論均是近似的，因此定量上的不符合不能被确定为物理假定的不适当所引起，或为計算上的不正确性所引起。1941年Kramers, Wannier应用了矩陣的方法，将求晶体的热力学函数的工作归結为求某矩陣的最大本征值問題，并且对于平面中方形晶点陣，严格地求出了临界温度。在1944年，Onsager将此方法发展，具体地求出了平面中晶体陣晶体的热力学函数(卽配分和)，获得了临界現象。这是此方面工作发展的巨大一步，此后的工作基本上沒有很多地超过。

因为Kramers, Wannier, Onsager等人的工作在数学上讲来是严格的，所以对他們的工作的評价一般是不低的，不过必須指出：将他們的工作应用至实际的晶体，是有很多困难的。他們的方法旣不能应用至三維空間中的任何晶点陣，也不易将非最近邻对的原子間的作用考虑进去。看来用代数方法来研究三維的晶点陣的秩序化問題有待于更多的工作。这本书的譯出，希望引起代数学者对此問題的注意。

关于这个問題，讀者还可以閱讀E. Montroll在Review Modern Physics 25(1953), 353的总結，以及Arnold Münster所著Statistical Thermodynamics (Berlin, Springer, 1956)一书中的叙述。因为Onsager論文数学气息較重，一般統計物理书中

都不列入。Münster 书中对此及其他研究合作現象的数学方法都有所介紹，当然对 Onsager 理論的介紹不如本书的詳尽。